

$\Delta T_{kl} = T_k - T_l$ их средних значений ОСО: чем больше ΔT_{kl} , тем больше расстояние S_{kl} . Однако это только тенденция. Например, расстояния между первым и пятым классами S_{15} и S_{24} для тренда при-

близительно одинаковы: 0,662 и 0,664 соответственно, а разность между средними значениями отличается почти в 2 раза: $\Delta T_{15} = 70,4$; $\Delta T_{24} = 38,4$.

Заключение

В результате проведенного исследования было установлено:

выделение составляющих разного временного масштаба и последующая классификация дают возможность с любой степенью подробности (вплоть до отдельной станции) выявлять районы с репрезентативным поведением озона и, как следствие, выявлять факторы, формирующие это поведение. Так, мы видим, что все составляющие ОСО в первом приближении образуют 2 пространственные области, с границей раздела по Западной Сибири. Но тонкая структура каждой области для каждой составляющей – своя.

Компактная пространственная локализация таксонов, охватывающая значительные территории для раз-

ных составляющих ОСО, свидетельствует, во-первых, о существовании общего для рассматриваемого региона механизма формирования ОСО и, во-вторых, о влиянии на него региональных факторов.

Независимость результатов классификации от выбора метода таксономии и типа метрики позволяет говорить о существовании устойчивых классов. Это утверждение справедливо как для исходного поля, так и каждой из его составляющих.

Полученные результаты могут служить основой для последующего моделирования эволюции озонового слоя с учетом его региональных особенностей.

Литература

1. Дюк В.А. Компьютерная психодиагностика. – С.-Пб.: Братство, 1994. – 364 с.
2. Загоруйко Н.Г., Елкина В.Н., Лбов Г.С. Алгоритмы обнаружения эмпирических закономерностей. – Новосибирск: Наука, 1985. – 105 с.

УДК 539.2.001.5:548.313/.4

Т.Я. Голубенко

ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ УПОРЯДОЧЕНИИ АТОМОВ В ГЦК ТВЕРДОМ РАСТВОРЕ

Образование сверхструктуры при упорядочении атомов в твердом растворе в большинстве случаев связано с появлением сложной доменной структуры [1]. Симметричные причины этого явления обсуждаются в настоящей статье.

В фазовом переходе типа упорядочения происходит потеря части элементов симметрии по сравнению со средней решеткой неупорядоченного сплава [2]. В соответствии с принципом Кюри [3] система стремится «восстановить» утраченную при переходе симметрию с помощью нового типа дефектов, которыми в упорядоченном сплаве являются антифазные границы (АФГ) и ориентационные двойники превращения. Теоретико-групповой анализ способов вложения низкосимметричной группы G_0 в высокосимметричную G проводился многими авторами [4–8] и уже давно стал традиционным при исследовании фазовых переходов. Однако для сверхструктур, образующихся при упорядочении в ГЦК твердом растворе, такой анализ отсутствует в литературе. Исключение составляет лишь

сверхструктура $D1_a$, рассмотренная в работе [8]. К тому же, в отличие от традиционных подходов, здесь проведена современная классификация доменной структуры путем построения варианто-образующей группы (VGG) [8].

С теоретико-групповой точки зрения равновероятно образуются все варианты упорядоченной фазы (домены), если они связаны операцией симметрии разупорядоченной матрицы, не являющейся элементом симметрии упорядоченной. Операторы, которые производят все варианты направлений (ориентационные домены) исходя из первоначально данного, образуют группу VGG. Для построения VGG в настоящей работе необходимо было разложить точечную группу O_h разупорядоченной структуры на смежные классы по подгруппе H_i (точечная группа i -го варианта упорядоченной фазы):

$$O_h = h_1 H_1 + h_2 H_2 + \dots + h_n H_n, \quad (1)$$

где $h_j \in H_j$ ($j = 1, 2, \dots, n$). VGG образуется, если брать по одному оператору так, чтобы полученная совокупность удовлетворяла аксиомам группы [9]. Найдены VGG для фазовых переходов типа упорядочения в

ГЦК твердом растворе. Результаты представлены в табл. 1, где приняты обозначения Шёнфлиса [9]. В ней также указано число различных ориентационных доменов, равное порядку VGG:

$$n = \frac{p}{q}, \quad (2)$$

где p – порядок группы O_h ($p = 48$), q – порядок H_j . Показано, какие операторы VGG принадлежат одному классу сопряженных элементов в O_h . Несопряженные операторы VGG приводят к появлению кристаллографически неэквивалентных границ, разделяющих в сверхструктуре ориентационные домены.

В табл. 2–5 в обозначениях Ковалева [10] приведены разложения группы O_h по формуле (1) для различных случаев VGG. По существу эти разложения являются доказательством того, что указанные сово-

купности элементов табл. 1 являются вариантообразующими группами.

Рассмотрены следствия изменения трансляционной симметрии при образовании сверхструктур в ГЦК твердом растворе. Найдено и приведено в табл. 1 число m различных вариантов трансляций (антифазных доменов):

$$m = \frac{V_0}{V}, \quad (3)$$

где V_0 – объем примитивной ячейки для сверхструктуры, V – для разупорядоченной фазы. Если ячейка непримитивна, то необходимо было делить на соответствующую кратность. С каждым потерянном при переходе вектором трансляций \vec{t} связана антифазная граница (АФГ), разделяющая в сверхструктуре антифазные домены. Общее число различных вариантов упорядоченной фазы равно произведению $m \cdot n$.

Проведенный теоретико-групповой анализ доменной структуры показал, что разнообразие доменного ансамбля в упорядочивающихся сплавах обусловлено тем, что в большинстве сверхструктур не сохраняется ни кристаллический класс, ни трансляционная симметрия исходной неупорядоченной фазы, как видно из табл. 1. В простом случае при сохранении трансляционной симметрии в сверхструктуре могли бы появиться только ориентационные домены. Однако появление всех рассмотренных сверхструктур в табл. 1 связано с изменением примитивной ячейки, и поэтому границ, разделяющих чисто ориентационные домены превращения, нет. В другом случае простая доменная структура будет наблюдаться при сохранении кристаллического класса исходной фазы. Классический пример этому – сплав Cu_3Au сверхструктуры $L1_2$ [1, 11]. Ориентационные домены там невозможны, а только антифазные, которые связаны с тремя кристаллографически неэквивалентными АФГ. Во всех остальных сверхструктурах будет встречаться третий тип смешанных доменов, которые преобразуются друг в друга под действием произведения двух элементов симметрии: элемента точечной симметрии $h \in VGG$ и вектора

трансляции \vec{t} , потерянного при упорядочении. Междоменная граница такого смешанного типа связана с элементом пространственной группы неупорядоченного твердого раствора: $g = \{h | \vec{t}\} \in O_h$. Домены смешанного типа, так же как и ориентационные, в силу исторических причин [12] называют двойниками.

С помощью теоретико-группового анализа в настоящей работе были выделены антипараллельные и перпендикулярные двойники превращения [3]. Оказалось, что в сверхструктурах кристаллического класса D_{4h} перпендикулярные двойники соответствуют наличию в VGG поворотов на 120° и 240° . Это имеет место для всех рассмотренных сверхструктур. Появление антипараллельных двойников связано с утратой плоскостей зеркального отражения при упорядочении, что требует наличия в VGG поворотов на 180° . Для сверхструктур класса D_{4h} этого нет. Полученный вывод согласуется с экспериментальными данными [13], которые свидетельствуют, что антипараллельные двойники в сверхструктурах встречаются гораздо реже, чем перпендикулярные.

Антипараллельные двойники должны наблюдаться в сверхструктуре $D1_a$. VGG допускает также образование перпендикулярных двойников. К тому же в сплавах этой сверхструктуры присутствуют и АФГ, что делает доменную структуру сложной.

На основании табл. 1 можно найти число кристаллографически неэквивалентных границ. Так, в сплаве Pt_2Mo число различных АФГ равно 5. Принимая также

во внимание, что элементы VGG принадлежат трем классам сопряженных элементов в O_h , имеем 15 неэквивалентных границ, и следует ожидать сложную доменную структуру. В сплавах $L1_3$ структуры теоретико-групповой анализ также предсказывает появление довольно сложной доменной структуры.

Особо выделяются длиннопериодические структуры $L1_2(M)$ и $L1_2(MM)$. В них число трансляционных доменов и вместе с ним общее число различных неэквивалентных междоменных границ зависит от периодов антифазности M ($M = 1, 2, \dots$). Например, в случае $M = 3$ число потерянных трансляций при образовании сверхструктуры $L1_2(M)$ равно 6. Учитывая VGG, имеем 12 кристаллографически неэквивалентных гра-

ниц. При увеличении M это число будет расти. Для сверхструктуры $L1_2(MM)$ в случае периодов антифазности $M_1 = 1, M_2 = 2$ различных границ 21. Это число также растет с ростом M_1 и M_2 , еще более усложняя доменный ансамбль.

Таким образом, в настоящей работе указаны причины образования сложной доменной структуры для фазовых переходов типа упорядочения в ГЦК твердом растворе. Симметричный анализ показал, что перпендикулярные двойники превращения сопровождают переходы беспорядок-порядок чаще, чем антипараллельные. Это предсказание соответствует экспериментальным данным.

Таблица 1

Варианто-образующие группы для сверхструктур, образующихся в ГЦК твердом растворе

Сверхструктура	Пространственная группа	Число ориентационных доменов	Число трансляционных доменов	Варианто-образующая группа
$L1_2$	O_h^1	1	4	{E}
$L1_0$	D_{4h}^1	3	2	{E} { $C_{31}^2 C_{31}^2$ }
$L1_3$	D_{2h}^{19} или D_{2h}^{25}	6	8	{E} { $C_{31}^2 C_{31}^2$ } { $U_4 U_5 U_6$ }
$L1_1$	D_{3d}^5	4	2	{E} { $C_{41}^2 C_{42}^2 C_{43}^2$ }
$D0_{22}$	D_{4h}^{17}	3	4	{E} { $C_{31}^2 C_{31}^2$ }
$D0_{23}$	C_{4h}^5	3	6	{E} { $C_{31}^2 C_{31}^2$ }
$D1_a$	D_{4h}^{17}	6	5	{E} { $C_{31}^2 C_{31}^2$ } { $\sigma_4 \sigma_5 \sigma_6$ }
тип Pt_2Mo	D_{2h}^{25}	6	6	{E} { $C_{31}^2 C_{31}^2$ } { $U_4 U_5 U_6$ }
$L1_2(M)$	D_{4h}^{17}	3	n(M)	{E} { $C_{31}^2 C_{31}^2$ }
$L1_2(MM)$	D_{2h}^{13}	6	n(M_1, M_2)	{E} { $C_{31}^2 C_{31}^2$ } { $U_4 U_5 U_6$ }

Таблица 2

Разложение группы O_h для сверхструктуры $L1_0$

H \ VGG	h_1	h_2	h_3	h_4	h_{13}	h_{14}	h_{15}	h_{16}	h_{25}	h_{26}	h_{27}	h_{28}	h_{37}	h_{38}	h_{39}	h_{40}
h_1	h_1	h_2	h_3	h_4	h_{13}	h_{14}	h_{15}	h_{16}	h_{25}	h_{26}	h_{27}	h_{28}	h_{37}	h_{38}	h_{39}	h_{40}
h_5	h_5	h_8	h_6	h_7	h_{21}	h_{22}	h_{23}	h_{24}	h_{29}	h_{30}	h_{31}	h_{32}	h_{45}	h_{46}	h_{47}	h_{48}
h_9	h_9	h_{11}	h_{12}	h_{10}	h_{17}	h_{18}	h_{19}	h_{20}	h_{33}	h_{34}	h_{35}	h_{36}	h_{41}	h_{42}	h_{43}	h_{44}

Таблица 3

Разложение группы O_h для сверхструктуры $L1_3$

$\begin{matrix} H \\ \backslash \\ VGG \end{matrix}$	h_1	h_2	h_3	h_4	h_{25}	h_{26}	h_{27}	h_{28}
h_1	h_1	h_2	h_3	h_4	h_{25}	h_{26}	h_{27}	h_{28}
h_5	h_5	h_8	h_6	h_7	h_{29}	h_{32}	h_{30}	h_{31}
h_9	h_9	h_{11}	h_{12}	h_{10}	h_{33}	h_{35}	h_{36}	h_{34}
h_{13}	h_{13}	h_{15}	h_{14}	h_{16}	h_{37}	h_{39}	h_{38}	h_{40}
h_{17}	h_{17}	h_{18}	h_{20}	h_{19}	h_{41}	h_{42}	h_{44}	h_{43}
h_{21}	h_{21}	h_{24}	h_{23}	h_{22}	h_{45}	h_{48}	h_{47}	h_{46}

Таблица 4

Разложение группы O_h для сверхструктуры $L1_1$

$\begin{matrix} H \\ \backslash \\ VGG \end{matrix}$	h_1	h_5	h_9	h_{13}	h_{17}	h_{21}	h_{25}	h_{29}	h_{33}	h_{37}	h_{41}	h_{45}
h_1	h_1	h_5	h_9	h_{13}	h_{17}	h_{21}	h_{25}	h_{29}	h_{33}	h_{37}	h_{41}	h_{45}
h_2	h_2	h_8	h_{11}	h_{15}	h_{18}	h_{24}	h_{26}	h_{32}	h_{35}	h_{39}	h_{42}	h_{48}
h_3	h_3	h_6	h_{12}	h_{14}	h_{20}	h_{23}	h_{27}	h_{30}	h_{36}	h_{38}	h_{44}	h_{47}
h_4	h_4	h_7	h_{10}	h_{16}	h_{19}	h_{22}	h_{28}	h_{31}	h_{34}	h_{40}	h_{43}	h_{46}

Таблица 5

Разложение группы O_h для сверхструктуры $D1_a$

$\begin{matrix} H \\ \backslash \\ VGG \end{matrix}$	h_1	h_4	h_{14}	h_{15}	h_{25}	h_{28}	h_{38}	h_{39}
h_1	h_1	h_4	h_{14}	h_{15}	h_{25}	h_{28}	h_{38}	h_{39}
h_5	h_5	h_8	h_{22}	h_{23}	h_{29}	h_{32}	h_{46}	h_{47}
h_9	h_9	h_{12}	h_{18}	h_{19}	h_{33}	h_{36}	h_{42}	h_{43}
h_{37}	h_{37}	h_{40}	h_{26}	h_{27}	h_{13}	h_{16}	h_2	h_3
h_{41}	h_{41}	h_{44}	h_{34}	h_{35}	h_{17}	h_{20}	h_{10}	h_{11}
h_{45}	h_{45}	h_{48}	h_{30}	h_{31}	h_{21}	h_{24}	h_6	h_7

Литература

1. Подковка В.П., Сизоненко Н.Р., Старенченко С.В., Тайлашев А.С., Козлов Э.В. Исследование кинетики роста и определение размеров антифазных доменов в упорядоченных сплавах // В сб.: Планарные дефекты в упорядоченных сплавах и интерметаллидах. – Барнаул, 1989. – С. 63–68.
2. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. I, II. / Собр. тр. – М.: Наука, 1969. – Т.1. – С. 234–261.
3. Сиротин Ю.И., Шаскальская М.П. Основы кристаллофизики. – М.: Наука, 1979. – 639 с.
4. Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. – М.: Наука, 1982. – 304 с.
5. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. – М.: Наука, 1984. – 248 с.
6. Guymont M. Domain structures arising from transitions between two crystals whose space groups are group-subgroup related // Phys. Rev. B. – 1978. – V. 18. – № 10. – P. 5385–5393.
7. Guymont M. Symmetry analysis of structural transitions between phases not necessarily group-subgroup related. Domain structures // Phys. Rev. B. – 1981. – V. 24. – № 5. – P. 2647–2655.
8. Tendeloo G.V., Amelinckx S. Group – theoretical considerations concerning domain formation in ordered alloys // Acta Cryst. – 1974. – V. A30. – P. 31–440.
9. Любарский Г.Я. Теория групп и ее применение в физике. – М.: Физматгиз, 1958. – 355 с.
10. Ковалев О.В. Неприводимые представления пространственных групп. – Киев: Изд-во АН УССР, 1961. – 153 с.
11. Sakai M., Mikkola D.E. The growth of antiphase domains of Cu_3Pt and Cu_3Au // Scripta Met. – 1980. – V.14. – № 6. – P. 1635–1641.
12. Wondratschek H. Twin domains and antiphase domains // Acta Cryst. – 1976. – С. A32. – Part 4. – P. 664–666.
13. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в металлических системах. – М.: Наука, 1989. – 248 с.

УДК 548.4:548.313

Т.Я. Голубенко, Э.В. Козлов

ВЛИЯНИЕ ПЛОСКОСТИ ЗАЛЕГАНИЯ НА ЭНЕРГИЮ АНТИФАЗНЫХ ГРАНИЦ В СВЕРХСТРУКТУРЕ $L1_2$

Проблема ориентационной зависимости энергии антифазной границы (АФГ) была поставлена давно, практически с самого начала изучения АФГ [1, 2]. Рентгеноструктурное и электронномикроскопическое исследования АФГ в сплавах со сверхструктурой $L1_2$ показали, что они стремятся залегать в плоскостях с определенной кристаллографической ориентацией, и тип плоскости меняется от сплава к сплаву [3–6].

Теоретическое рассмотрение энергии АФГ в рамках парного межатомного взаимодействия требует учета нескольких координационных сфер. Кристаллогеометрия АФГ такова, что аналитическая зависимость энергии АФГ от кристаллографических индексов $h k l$ в общем случае получена быть не может. Для определения зависимости энергии АФГ от кристаллографических индексов плоскости залегания требуется подсчет изменения числа одноименных и разноименных связей на каждой координационной сфере через плоскость АФГ.

Решение задачи об ориентационной зависимости энергии АФГ имеет значение, выходящее за рамки проблемы самих АФГ. Дело в том, что закономерности превращения порядок-беспорядок и температурная зависимость параметра дальнего порядка у различных сплавов со сверхструктурой $L1_2$ заметно отличаются [7], и причина этого прежде всего в различной зависимости энергии упорядочения от номера координационной сферы у разных сплавов.

В настоящее время единственный способ получения сведений о величине энергии упорядочения на нескольких координационных сферах лежит в анализе экспериментальных данных о преимущественной ориентации АФГ. Поэтому теоретическое решение задачи анизотропии энергии АФГ является актуальным.

Удельная энергия АФГ γ есть разность энергии кристалла с АФГ E_1 и без нее E_0 , приходящаяся на единицу площади:

$$\gamma = \frac{E_1 - E_0}{S} \quad (1)$$

где S – площадь АФГ. В настоящей работе рассмотрение ведется в рамках приближения парного меж-

атомного взаимодействия с учетом первых трех координационных сфер. Энергия упорядочения V_i :

$$V_i = V_{AA}^i + V_{BB}^i - 2V_{AB}^i, \quad (2)$$

где i – номер координационной сферы. Здесь используется модель жесткой решетки с энергией взаимодей-

ствия, не зависящей от степени порядка и наличия АФГ.