

Планарные сверхструктурные дефекты в сплавах сверхструктуры $L1_0$

© 2022

*Халиков Альберт Рашитович**^{1,4}, кандидат физико-математических наук, доцент
Бебихов Юрий Владимирович^{2,5}, кандидат физико-математических наук, доцент
Корзникова Елена Александровна^{1,6}, доктор физико-математических наук, профессор
Дмитриев Сергей Владимирович^{3,7}, доктор физико-математических наук, профессор,
ведущий научный сотрудник

¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

²Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова
в г. Мирном, Мирный (Россия)

³Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук, Уфа (Россия)

*E-mail: khalikov.albert.r@gmail.com

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3663-784X>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Поступила в редакцию 29.04.2022

Принята к публикации 13.09.2022

Аннотация: Планарные сверхструктурные дефекты оказывают большое влияние на механические и функциональные свойства бинарных упорядоченных сплавов сверхструктуры $L1_0$ на основе ГЦК решетки, но полный анализ их структуры и энергии сублимации в литературе отсутствует. В данной работе для сплавов сверхструктуры $L1_0$ стехиометрического состава AB приведены выражения для расчета энергии сублимации и энергии планарного сверхструктурного дефекта в модели твердых координационных сфер и парных межатомных взаимодействий. Тетрагональность кристаллической решетки не учитывалась. Структура упорядоченного сплава была представлена в виде объединения четырех монокристаллических простых кубических решеток, две из которых заняты атомами A , а две другие – атомами B . Такой подход позволяет рассчитать энергию сублимации, необходимую для испарения кристалла. В работе учитывались первые восемь координационных сфер. Показан алгоритм определения всех возможных геометрически различных представлений сверхструктуры $L1_0$, имеющих одинаковую энергию сублимации. Приведено выражение для нахождения плоскостей залегания всех возможных консервативных антифазных границ. Установлено, что в бинарных упорядоченных сплавах сверхструктуры $L1_0$ на основе ГЦК решетки присутствуют консервативные и неконсервативные антифазные границы, а также консервативные и неконсервативные границы C -доменов. Алгоритмы, описанные в данной работе, позволяют проводить кристаллогеометрический анализ планарных дефектов как в бинарных, так и в многокомпонентных упорядоченных сплавах с различными сверхструктурами.

Ключевые слова: планарные сверхструктурные дефекты; сверхструктура $L1_0$; C -домены; антифазные границы; ГЦК решетка.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УГАТУ» (соглашение № 075-03-2022-318/1) «Молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ "Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях"» для Е.А. Корзниковой (проведение расчетов), гранта НШ-4320.2022.1.2 для Е.А. Корзниковой (анализ и обсуждение полученных результатов), гранта РНФ 21-12-00229 для С.В. Дмитриева (постановка задачи, концептуализация исследования).

Для цитирования: Халиков А.Р., Бебихов Ю.В., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Планарные сверхструктурные дефекты в сплавах сверхструктуры $L1_0$ // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 90–98. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-2-90-98.

ВВЕДЕНИЕ

Интерметаллиды образуют широкий класс упорядоченных соединений, состоящих из двух или трех атомов. Как правило, такие соединения относятся к стехиометрии AB , A_3B , A_3B_5 , A_2BC [1] и упорядочены по различным типам, таким как $A15$, $B2$, $C15$, $B03$, $L1_0$, $L1_2$, $L1_3$, имеющим в своей основе различные кристаллические структуры. Часто такие интерметаллиды обладают хорошими прочностными и конструктивными характеристиками [2; 3], что обуславливает их широкое промышленное применение [3; 4].

Интерес к сверхструктурам $L1_0$ обусловлен тем, что упорядоченная кристаллическая структура $L1_0$ интерметаллида $TiAl$ обладает высокой радиационной стойкостью [5]. Пленки на основе $L1_0$ могут быть использованы для будущего материала носителя записи ввиду их стойкости к магнитным воздействиям [6–8].

Исследования структуры и свойств упорядоченных сплавов, описанные в работах [1; 2; 9], показали, что теория межфазных и антифазных границ в сплавах с ГЦК решеткой развивалась в моделях парных взаимодействий и жестких координационных сфер [10]. Расчеты энергии планарных сверхструктурных дефектов

сводятся к формированию парных взаимодействий поперек плоскости дефекта [11]. Анализ симметрии используется для описания всех возможных типов планарных сверхструктурных дефектов в сверхструктуре $L1_0$ и для получения списка кристаллографических плоскостей, в которых возможны консервативные антифазные границы [12–14]. Литературный обзор показал, что систематический анализ структуры и энергии планарных сверхструктурных дефектов в сплавах со сверхструктурой $L1_0$ не проводился.

В отличие от сплавов и твердых растворов, в сверхструктурах упорядоченных сплавов возможно образование значительного количества различных дефектов, которые, в свою очередь, могут влиять на энергию сублимации сплава [15–17]. К таким дефектам относятся дефекты упаковки атомов, антифазные границы, термические антифазные границы и т. п. [18; 19]. Разнообразие дефектов приводит к необходимости их анализа и классификации на основе кристаллометрического анализа сверхструктуры.

Изучение упорядоченных сплавов позволяет решать такую задачу, как создание материалов с заранее заданными прочностными характеристиками [20], предназначенных для использования в экстремальных условиях и агрессивных средах [3; 5]. При этом особую роль в формировании прочностных характеристик упорядоченных сплавов играют дефекты структуры [21; 22], которые препятствуют движению дислокаций [23]. Кристаллометрический анализ используется при исследовании нелинейной динамики бездефектных упорядоченных сплавов [18; 21; 22].

В данной работе рассматривается кристаллометрический анализ бинарных сплавов сверхструктуры $L1_0$ на основе ГЦК решетки. При этом в расчетах приняты некоторые допущения, одно из которых – предположение о том, что атомы занимают узлы жесткой кристаллической решетки или, иными словами, в расчетах не учитывается эффект атомной релаксации.

Цель исследования – на основе кристаллометрического анализа охарактеризовать все возможные планарные сверхструктурные дефекты в упорядоченных сплавах типа $L1_0$.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для анализа сверхструктурных дефектов в упорядоченном сплаве были использованы методы кристаллометрического и симметричного анализа.

Опишем упаковку атомов в бинарном сплаве стехиометрического состава AB на основе ГЦК решетки. Тетрагональностью решетки для простоты пренебрегаем. Пусть кубическая ячейка, показанная на рис. 1 в декартовой системе координат x, y, z , имеет параметр решетки a .

Кристаллометрический анализ сплава удобно проводить, принимая $a=2$: в этом случае все координаты атомов будут выражены целыми числами [23]. Атомы сверхструктуры $L1_0$ занимают узлы ГЦК решетки, тогда векторы переноса кубической решетки равны $u_1=(2,0,0)$, $u_2=(0,2,0)$, $u_3=(0,0,2)$. Кубические одноатомные подрешетки пронумерованы от 1 до 4. Подрешетки 1 и 2 (3 и 4) заняты атомами A (B). Эта сверхструктура

представляет собой объединение четырех одноатомных простых кубических решеток, две из которых заняты атомами A , а две другие – атомами B . Атомы A и B показаны на рис. 1.

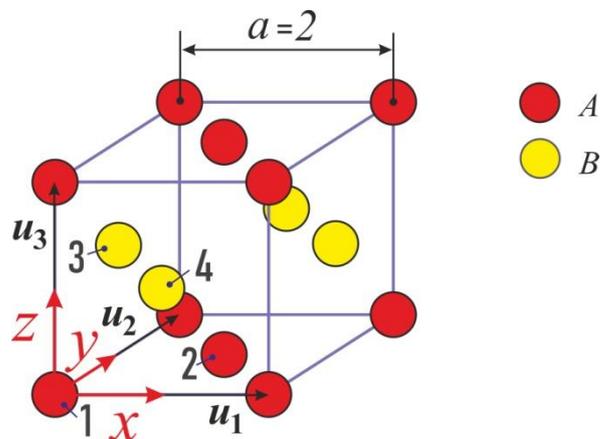


Рис. 1. Кубическая ячейка сверхструктуры $L1_0$ на основе ГЦК решетки

Fig. 1. Cubic cell of the $L1_0$ superstructure based on the fcc lattice

Сначала определим решетку L как множество точек в трехмерном пространстве с радиус-векторами

$$x = \sigma_1 u_1 + \sigma_2 u_2 + \sigma_3 u_3, \quad (1)$$

где $\sigma_i, i=1, 2, 3$ – любые целые числа; u_i – три линейно независимых вектора, определяющих базис решетки.

Простая кубическая решетка L^c с параметром решетки $a=2$ порождается векторами

$$u_1 = (2,0,0); u_2 = (0,2,0); u_3 = (0,0,2). \quad (2)$$

Сверхструктура $L1_0$, как отмечалось выше, может быть определена как объединение 4 одноатомных кубических решеток L^c (пронумерованных индексом $m=1, 2, 3, 4$), сдвинутых на векторы μ_m , где атомы сорта S_m занимают точки m -й сдвинутой решетки:

$$Q = \bigcup_{m=1}^4 (L^c + \mu_m) S_m, \quad (3)$$

где векторы сдвига равны

$$\mu_1 = (0,0,0); \mu_2 = (1,1,0); \mu_3 = (0,1,1); \mu_4 = (1,0,1). \quad (4)$$

Сдвинутые кубические решетки заполнены атомами сортов A и B следующим образом (рис. 1):

$$S_1 = A; S_2 = A; S_3 = B; S_4 = B. \quad (5)$$

Выражения (2)–(5) определяют сверхструктуру $L1_0$ как объединение четырех одноатомных кубических решеток.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Рассчитаем энергию сублимации, необходимую для испарения кристалла (разрыва всех межатомных связей). Межатомные взаимодействия описываются парными потенциалами $\varphi_{S_i S_j}(r)$, где φ – энергия взаимодействия атомов сортов S_i и S_j , находящихся на расстоянии r . Рассмотрим сверхструктуру $L1_0$, определяемую выражениями (2)–(5). Энергия сублимации сверхструктуры Q на единицу объема может быть записана следующим образом:

$$E = \frac{1}{|U|} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^4 \sum_{\sigma_1, \sigma_2 = -\infty}^{+\infty} \varphi_{S_i S_j}(|A|) + \frac{1}{2|U|} \sum_{i=1}^4 \left[-\varphi_{S_i S_j}(0) + \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 = -\infty}^{+\infty} \varphi_{S_i S_j}(|B|) \right], \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} A &= \sigma_1 u_1 + \sigma_2 u_2 + \sigma_3 u_3 + \mu_i - \mu_j, \\ B &= \sigma_1 u_1 + \sigma_2 u_2 + \sigma_3 u_3. \end{aligned} \quad (7)$$

В уравнении (6) первая строка представляет собой энергию взаимодействия моноатомных сдвинутых решеток, а вторая строка – энергию взаимодействия атомов в моноатомных сдвинутых решетках. $U=a^3=8$ – объем примитивной трансляционной ячейки, который можно вычислить как определитель матрицы U , строки которой содержат декартовы координаты векторов u_i , заданных (2). На практике пределы суммирования по индексам σ_i конечны, достаточны для учета всех взаимодействий в пределах радиуса отсечки потенциалов.

Раскрывая суммы в уравнении (6), выразим энергию сублимации сплава в единице объема через парные потенциалы с учетом взаимодействий до 8-й координационной сферы

$$E = \frac{1}{a^3} \left[\begin{aligned} &4\varphi_{AA}(R_1) + 16\varphi_{AB}(R_1) + 4\varphi_{BB}(R_1) + \\ &+ 6\varphi_{AA}(R_2) + 6\varphi_{BB}(R_2) + \\ &+ 8\varphi_{AA}(R_3) + 32\varphi_{AB}(R_3) + 8\varphi_{BB}(R_3) + \\ &+ 12\varphi_{AA}(R_4) + 12\varphi_{BB}(R_4) + \\ &+ 8\varphi_{AA}(R_5) + 32\varphi_{AB}(R_5) + \\ &+ 8\varphi_{BB}(R_5) + 8\varphi_{AA}(R_6) + 8\varphi_{BB}(R_6) + \\ &+ 16\varphi_{AA}(R_7) + 64\varphi_{AB}(R_7) + \\ &+ 16\varphi_{BB}(R_7) + 6\varphi_{AA}(R_8) + 6\varphi_{BB}(R_8) \end{aligned} \right], \quad (8)$$

где R_i – радиусы координационных сфер:

$$R_1 = a/\sqrt{2}; R_2 = a; R_3 = \frac{a}{\sqrt{3/2}}; R_4 = \frac{a}{\sqrt{2}};$$

$$R_5 = \frac{a}{\sqrt{5/2}}; R_6 = \frac{a}{\sqrt{3}}; R_7 = \frac{a}{\sqrt{7/12}}; R_8 = 2a. \quad (9)$$

Из выражения (8) следует, что в пределах первых восьми координационных сфер на нечетных координа-

ционных сферах вклад в энергию сублимации дают связи AA , AB и BB , а на четных – вклад в энергию сублимации появляется только от AA и BB .

Опишем энергетически эквивалентные, но геометрически различные представления сверхструктуры $L1_0$. Предполагаем, что сверхструктура $L1_0$ определяется уравнениями (2)–(5). Операции симметрии, применяемые к сверхструктуре $L1_0$, такие как сдвиг на решеточный вектор или преобразования точечной симметрии кубической решетки, не изменяют взаимного расположения атомов и, следовательно, не изменяют энергию сублимации сплава. Здесь мы стремимся найти все возможные геометрически различные представления сверхструктуры $L1_0$, имеющие одинаковую энергию сублимации. Для этого сначала сдвигаются атомы по векторам решетки μ_m , $i=1, 2, 3, 4$, определяемым уравнением (4), а затем производятся преобразования кубической решетки к сверхструктуре $L1_0$.

Проанализируем сдвиги вдоль векторов решетки. В таблице 1 показано изменение сортов атомов четырех кубических сдвинутых решеток, S_i , для векторов сдвига μ_j , заданных выражением (4). Сдвиги выполняются по $(\mu_m - \mu_j) \bmod(2)$, то есть компоненты векторов после вычитания возвращаются к объему кубической поступательной ячейки с параметром решетки $a=2$. Из таблицы 1 видно, что сдвиг на векторы μ_1 и μ_2 не меняет расположение сортов атома. С другой стороны, сдвиги на векторы μ_3 и μ_4 меняют местами сорта атомов A и B .

Применение 48-точечных преобразований симметрии кубической решетки позволяет выявить энергетически эквивалентные представления сверхструктуры $L1_0$, отличные от приведенных в таблице 1.

Таблица 1. Изменение атомных сортов в результате сдвигов на вектор μ_m

Table 1. Change in the atomic types in the results of shears on μ_m vector

Вектор сдвига	$\mu_1=(0,0,0), \mu_2=(1,1,0)$
S_i после сдвига	$AABB$
Вектор сдвига	$\mu_3=(0,1,1), \mu_4=(1,0,1)$
S_i после сдвига	$BBA A$

На рис. 2 показаны все возможные энергетически эквивалентные и геометрически различные представления сверхструктуры $L1_0$. На рис. 2 а и 2 б показаны структуры, перечисленные в таблице 1. Другие структуры перечислены в таблице 2. Структуры $AABB$ (рис. 2 а) и $BBA A$ (рис. 2 б) могут быть преобразованы друг в друга сдвигом вектора решетки. То же самое верно для структур $ABBA$ (рис. 2 с) и $ABAB$ (рис. 2 д), а также для структур $BAAB$ (рис. 2 е) и $BABA$ (рис. 2 ф). Структуры $AABB$ (рис. 2 а) и $BBA A$ (рис. 2 б) могут быть преобразованы одна в другую поворотом на $\pi/2$ вокруг оси x . Структуры $BBA A$ (рис. 2 б) и $ABBA$ (рис. 2 с) могут быть преобразованы одна в другую поворотом на $\pi/2$ вокруг оси y . Структуры $BBA A$ (рис. 2 б) и $BAAB$ (рис. 2 е) могут быть преобразованы одна

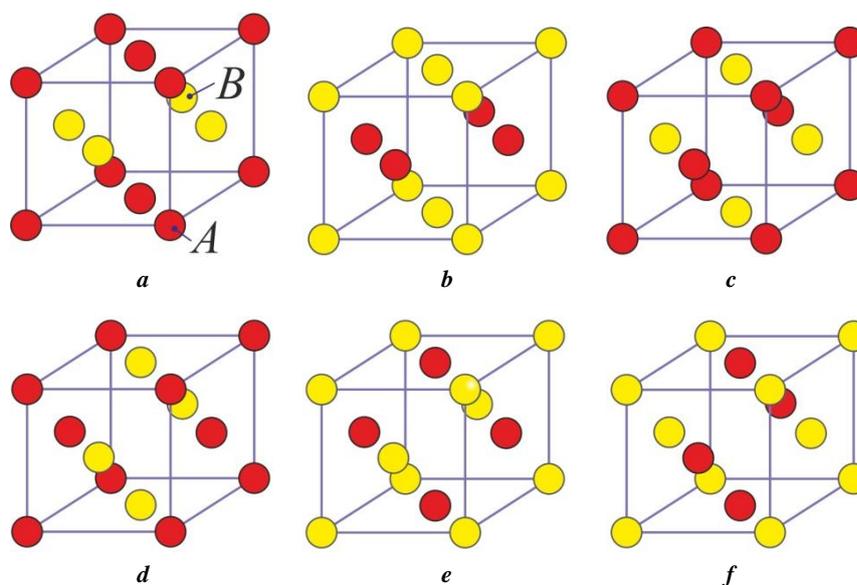


Рис. 2. Расположение атомов A и B в сверхструктуре $L1_0$:
a – структура $AABB$; **b** – структура $BBAA$; **c** – структура $ABBA$;
d – структура $ABAB$; **e** – структура $BAAB$; **f** – структура $BABA$

Fig. 2. The location of A and B in the $L1_0$ superstructure:
a – $AABB$ structure; **b** – $BBAA$ structure; **c** – $ABBA$ structure;
d – $ABAB$ structure; **e** – $BAAB$ structure; **f** – $BABA$ structure

Таблица 2. Изменение атомных сортов в результате преобразований точечной симметрии
Table 2. Change in the atomic types in the results of point symmetry operation

Трансформация	Вращение $AABB$ на $\pi/2$ вокруг оси x
S_i после трансформации	$ABBA$
Трансформация	Вращение $AABB$ на $\pi/2$ вокруг оси y
S_i после трансформации	$ABAB$
Трансформация	Вращение $BBAA$ на $\pi/2$ вокруг оси x
S_i после трансформации	$BAAB$
Трансформация	Вращение $BBAA$ на $\pi/2$ вокруг оси y
S_i после трансформации	$BABA$

в другую поворотом на $\pi/2$ вокруг оси x . Структуры $BBAA$ (рис. 2 b) и $BABA$ (рис. 2 f) могут быть преобразованы одна в другую поворотом на $\pi/2$ вокруг оси y .

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На основе описанных выше результатов можно описать все возможные планарные сверхструктурные дефекты (ПСД) в сверхструктуре $L1_0$. Плоскость ПСД разделяет геометрически разные, но энергетически эквивалентные представления сверхструктуры $L1_0$. Будем различать антифазные границы и C -домены. Консервативная антифазная граница (КАГ) разделяет два домена, которые могут быть наложены друг на друга сдви-

гом на вектор решетки, параллельный плоскости дефекта. Неконсервативная антифазная граница (НКАГ) образуется, если вектор сдвига не может быть параллелен плоскости дефекта. Граница C -домена разделяет две области, которые можно наложить друг на друга при повороте на угол $\pi/2$. В некоторых случаях после поворота требуется сдвиг на вектор решетки.

На рис. 3 и рис. 4 показана сверхструктура $L1_0$ и планарные сверхструктурные дефекты с ориентацией (001) и (100) соответственно.

На рис. 3 а изображена бездефектная сверхструктура $L1_0$, а на рис. 3 b–f показаны пять различных типов ПСД с ориентацией (001); плоскость дефекта заштрихована. Ниже плоскости дефекта во всех случаях

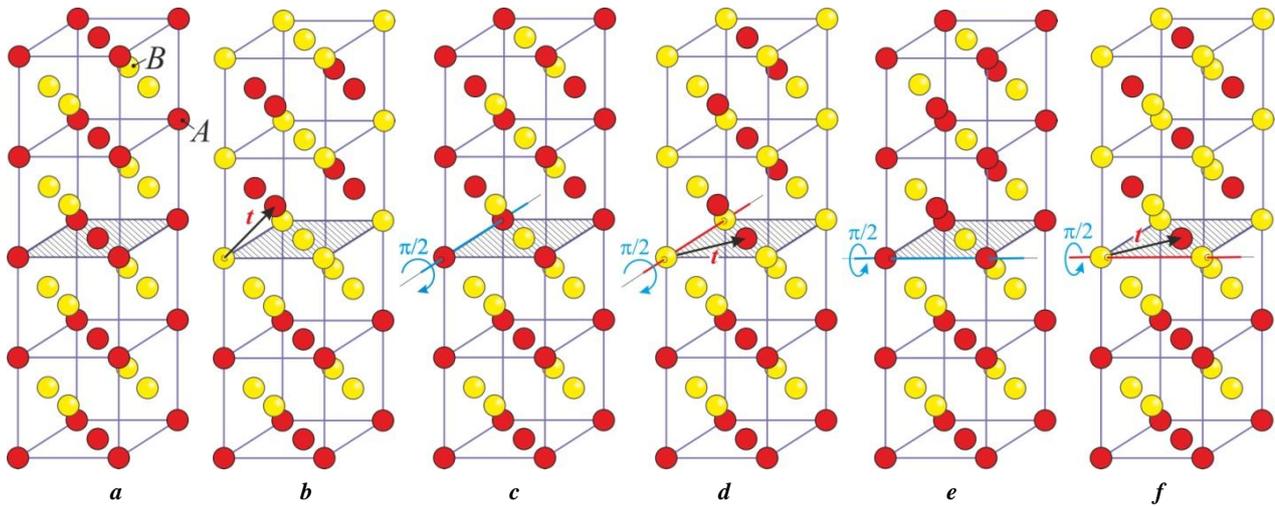


Рис. 3. Сверхструктура $L1_0$ (a) и планарные сверхструктурные дефекты с ориентацией (001) (b–f)
Fig. 3. $L1_0$ superstructure and planar superstructure defects with (001) (b–f) orientation

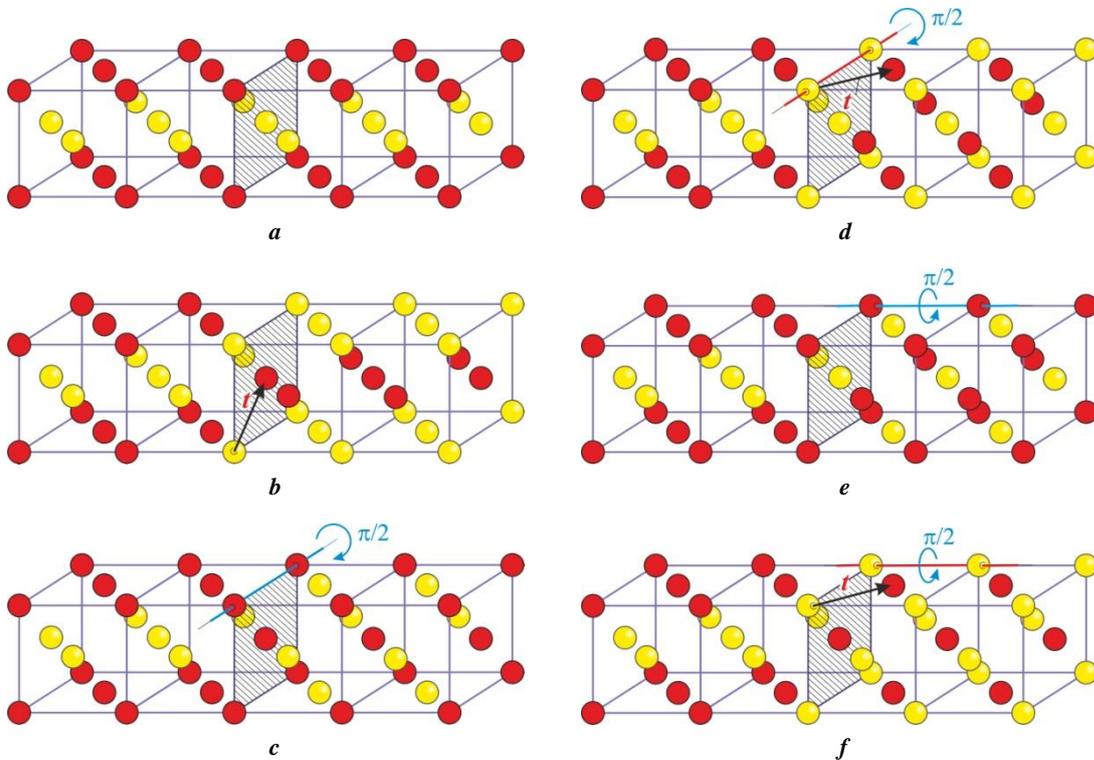


Рис. 4. Сверхструктура $L1_0$ (a) и планарные сверхструктурные дефекты с ориентацией (100) (b–f)
Fig. 4. $L1_0$ superstructure (a) and planar superstructure defects with (100) (b–f) orientation

располагается домен $AABB$. Над дефектом находится область $AABB$ (рис. 3 а), $BBAА$ (рис. 3 б), $АВАВ$ (рис. 3 с), $ВАВА$ (рис. 3 d), $АВВА$ (рис. 3 е) и $ВААВ$ (рис. 3 ф). Согласно описанной выше классификации, на рис. 3 б изображена НКАГ, так как вектор сдвига t , налагающийся на две области, не параллелен плоскости дефекта. Все остальные дефекты являются С-доменами. На рис. 3 d и 3 ф после поворота на $\pi/2$ применен сдвиг на вектор t .

Как видно, образование КАГ невозможно в случае ориентации (001), но возможно для ориентаций (010) и (100), как будет показано далее.

На рис. 4 а показана бездефектная сверхструктура $L1_0$. Рис. 4 б–f показывают пять различных типов ПСД с ориентацией (100); плоскость дефекта заштрихована. Слева от плоскости дефекта во всех случаях располагается домен $AABB$. Справа от дефекта находится область $AABB$ (рис. 4 а), $BBAА$ (рис. 4 б), $АВАВ$ (рис. 4 с), $ВААВ$ (рис. 4 d), $АВВА$ (рис. 4 е) и $ВАВА$ (рис. 4 ф). На рис. 4 б представлена КАГ, так как вектор сдвига t параллелен плоскости дефекта. Все остальные дефекты являются С-доменами. На рис. 4 d и 4 ф после поворота на $\pi/2$ применен сдвиг на вектор t .

Области $AABB$ и $BBAА$ формируют КАГ или НККАГ, поскольку они могут быть наложены сдвигом на вектор решетки. То же самое верно для доменов $ABBA$ и $BAAB$, а также для доменов $ABAB$ и $BABA$.

Домен $AABB$ (или $BBAА$) вместе с любым доменом, кроме $BBAА$ (или $AABB$), образуют C -домен. Точно так же домен $ABBA$ (или $BAAB$) вместе с любым доменом, кроме $BAAB$ (или $ABBA$), образуют C -домен. Домен $ABAB$ (или $BABA$) вместе с любым доменом, кроме $BABA$ (или $ABAB$), образуют C -домен.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

На основании полученных результатов можно сделать вывод, что на нечетных координационных сферах вклад в энергию сублимации дают связи AA , AB и BB , а на четных – вклад в энергию сублимации появляется только от связей AA и BB . Расчет энергии сублимации сплава проводили на единицу объема для первых восьми координационных сфер.

Как показали расчеты, в результате сдвига на решеточный вектор изменение сортов атомов четырех кубических сдвинутых решеток для векторов сдвига $\mu_1=(0,0,0)$, $\mu_2=(1,1,0)$ не меняет расположение сортов атомов A и B , тогда как $\mu_3=(0,1,1)$ и $\mu_4=(1,0,1)$ меняют местами сорта этих атомов. Изменение атомных сортов в результате преобразований точечной симметрии позволяет выявить энергетически эквивалентные представления сверхструктуры $L1_0$, которые имеют следующий вид: $ABBA$, $ABAB$, $BAAB$, $BABA$.

В работе описаны планарные сверхструктурные дефекты в сверхструктуре $L1_0$ с ориентацией (001) и (100) . Показано, что образование консервативной антифазной границы невозможно в случае ориентации (001) , но возможно для ориентаций (010) и (100) .

Метод, представленный в данной работе, позволяет проводить кристаллогеометрический анализ как бинарных, так и многокомпонентных упорядоченных сплавов с различными сверхструктурами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Starostenkov M.D., Dmitriev S.V., Bakaldin A.V. Antiphase boundary formation energies in $L1_0$ and $L1_1$ superstructures // Russian Physics Journal. 1993. Vol. 36. № 3. P. 242–246. DOI: [10.1007/BF00559628](https://doi.org/10.1007/BF00559628).
- Kulkarni U.D., Hata S., Nakano T., Mitsuhashi M., Ikeda K., Nakashima H. Monte Carlo simulation of antiphase boundaries, growth of antiphase domains in Al_5Ti_3 phase in Al-rich-TiAl intermetallics // Philosophical Magazine. 2011. Vol. 91. № 22. P. 3068–3078. DOI: [10.1080/14786435.2011.563761](https://doi.org/10.1080/14786435.2011.563761).
- Khalikov A.R., Sharapov E.A., Valitov V.A., Galieva E.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Simulation of diffusion bonding of different heat resistant nickel-base alloys // Computation. 2020. Vol. 8. № 4. P. 1–12. DOI: [10.3390/computation8040102](https://doi.org/10.3390/computation8040102).
- Bahamida S., Fnidiki A., Coisson M., Barrera G., Celegato F., Olivetti E.S., Tiberto P., Laggoun A., Boudissa M. Effect of the Al to $L1_0$ transformation on the structure, magnetic properties of polycrystalline $Fe_{56}Pd_{44}$ alloy thin films produced by thermal evaporation technique // Thin Solid Films. 2018. Vol. 668. P. 9–13. DOI: [10.1016/j.tsf.2018.10.013](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2018.10.013).
- Voskoboinikov R. A contribution of $L1_0$ ordered crystal structure to the high radiation tolerance of γ -TiAl intermetallics // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2019. Vol. 460. P. 92–97. DOI: [10.1016/j.nimb.2019.04.080](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.04.080).
- Kumar S., Sharma K., Sharma G., Gupta A., Raghavendra Reddy V., Gome A., Das S.C. Effect of composition on $L1_0$ ordering, structural and magnetic properties of $Fe_{100-x}Pt_x$ alloy films prepared by controlled sputtering // Materials Today: Proceedings. 2021. Vol. 60. P. 945–948. DOI: [10.1016/j.matpr.2021.11.222](https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.11.222).
- Kohn A., Tal N., Elkayam A., Kovács A., Li D., Wang S., Ghannadzadeh S., Hesjedal T., Ward R.C.C. Structure of epitaxial $L1_0$ -FePt/MgO perpendicular magnetic tunnel junctions // Applied Physics Letters. 2013. Vol. 102. № 6. Article number 062403. DOI: [10.1063/1.4791576](https://doi.org/10.1063/1.4791576).
- Rani P., Kashyap M.K., Singla R., Thakur J., Reshak A.H. Magnetism and magnetocrystalline anisotropy of tetragonally distorted $L1_0$ -FeNi N alloy // Journal of Alloys and Compounds. 2020. Vol. 835. Article number 155325. DOI: [10.1016/j.jallcom.2020.155325](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.155325).
- Kozubski R., Kozłowski M., Wrobel J., Wejrzanowski T., Kurzydłowski K.J., Goyhenex C., Pierron-Bohnes V., Rennhofer M., Malinov S. Atomic ordering in nano-layered FePt: Multiscale Monte Carlo simulation // Computational Materials Science. 2010. Vol. 49. № 1 SUPPL. P. S80–S84. DOI: [10.1016/j.commatsci.2010.01.046](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.01.046).
- Khromov K.Yu., Pankratov I.R., Vaks V.G. Generalized Ginzburg-Landau theory of antiphase, interphase boundaries in alloys ordered with a single order parameter: $B2$ -, $L1_0$ -type ordering // Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics. 2005. Vol. 72. № 9. Article number 094207. DOI: [10.1103/PhysRevB.72.094207](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.094207).
- Liu Y., Bierbrauer U., Seick C., Weber S.T., Hofherr M., Schmidt N.Y., Albrecht M., Steil D., Mathias S., Schneider H.C., Rethfeld B., Stadtmüller B., Aeschlimann M. Ultrafast magnetization dynamics of Mn-doped $L1_0$ FePt with spatial inhomogeneity // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2020. Vol. 502. Article number 166477. DOI: [10.1016/j.jmmm.2020.166477](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166477).
- Le Bouar Y., Loiseau A., Finel A. Origin of the complex wetting behavior in Co-Pt alloys // Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics. 2003. Vol. 68. № 22. Article number 224203. DOI: [10.1103/PhysRevB.68.224203](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.224203).
- Mohri T., Ohno M., Chen Y. First-principles calculations of phase equilibria, transformation dynamics of Fe-based alloys // Journal of Phase Equilibria and Diffusion. 2006. Vol. 27. № 1. P. 47–53. DOI: [10.1361/105497106X92790](https://doi.org/10.1361/105497106X92790).
- Zhang S., Qi W., Huang B. Size effect on order-disorder transition kinetics of FePt nanoparticles // Journal of Chemical Physics. 2014. Vol. 140. № 4. Article number 044328. DOI: [10.1063/1.4863350](https://doi.org/10.1063/1.4863350).
- Khalikov A.R., Sharapov E.A., Korznikova E.A., Potekaev A.I., Starostenkov M.D., Galieva E.V., Dmitriev S.V. Monte Carlo Simulation of Diffusion

- Processes in Three-Component Alloys // *Russian Physics Journal*. 2019. Vol. 62. № 4. P. 691–697. DOI: [10.1007/s11182-019-01765-1](https://doi.org/10.1007/s11182-019-01765-1).
16. Shcherbinin S.A., Krylova K.A., Chechin G.M., Soboleva E.G., Dmitriev S.V. Delocalized nonlinear vibrational modes in fcc metals // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2022. Vol. 104. Article number 106039. DOI: [10.1016/j.cnsns.2021.106039](https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2021.106039).
 17. Varvaro G., Imperatori P., Laureti S., Cannas C., Ardu A., Plescia P., Capobianchi A. Synthesis of L1₀ alloy nanoparticles. Potential and versatility of the pre-ordered precursor reduction strategy // *Journal of Alloys and Compounds*. 2020. Vol. 846. Article number 156156. DOI: [10.1016/j.jallcom.2020.156156](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.156156).
 18. Cherednichenko A.I., Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Sysoeva M.O., Eremin A.M. Nonlinear supratransmission in a Pt₃Al crystal at intense external influence // *Computer Research and Modeling*. 2019. Vol. 11. № 1. P. 109–117. DOI: [10.20537/2076-7633-2019-11-1-109-117](https://doi.org/10.20537/2076-7633-2019-11-1-109-117).
 19. Frommen C., Rösner H. Observation of long-period superstructures in chemically synthesised CoPt nanoparticles // *Materials Letters*. 2004. Vol. 58. № 1-2. P. 123–127. DOI: [10.1016/S0167-577X\(03\)00428-2](https://doi.org/10.1016/S0167-577X(03)00428-2).
 20. Khalikov A.R., Iskandarov A.M. Modeling of the Ordering Kinetics of a Binary Alloy via a Vacancy Diffusion Mechanism in the Solid Sphere Model // *Russian Physics Journal*. 2013. Vol. 55. № 12. P. 1470–1477. DOI: [10.1007/s11182-013-9980-0](https://doi.org/10.1007/s11182-013-9980-0).
 21. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V., Ekomasov E.G., Zhou K., Surface discrete breathers in Pt₃Al intermetallic alloy // *Surface Science*. 2019. Vol. 679. P. 1–5. DOI: [10.1016/j.susc.2018.08.011](https://doi.org/10.1016/j.susc.2018.08.011).
 22. Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Eremin A.M., Lutsenko I.S., Dmitriev S.V. Excitation of Soliton-Type Waves in Crystals of the A₃B Stoichiometry // *Physics of the Solid State*. 2019. Vol. 61. № 11. P. 2160–2166. DOI: [10.1134/S1063783419110416](https://doi.org/10.1134/S1063783419110416).
 23. Khalikov A.R., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Sharapov E.A., Dmitriev S.V. Structure, energy of planar superstructure defects in X₂YZ Heusler alloys // *Intermetallics*. 2021. Vol. 137. Article number 107276. DOI: [10.1016/j.intermet.2021.107276](https://doi.org/10.1016/j.intermet.2021.107276).
- REFERENCES**
1. Starostenkov M.D., Dmitriev S.V., Bakaldin A.V. Antiphase boundary formation energies in L1₀ and L1₁ superstructures. *Russian Physics Journal*, 1993, vol. 36, no. 3, pp. 242–246. DOI: [10.1007/BF00559628](https://doi.org/10.1007/BF00559628).
 2. Kulkarni U.D., Hata S., Nakano T., Mitsuhashi M., Ikeda K., Nakashima H. Monte Carlo simulation of antiphase boundaries, growth of antiphase domains in Al₅Ti₃ phase in Al-rich-TiAl intermetallics. *Philosophical Magazine*, 2011, vol. 91, no. 22, pp. 3068–3078. DOI: [10.1080/14786435.2011.563761](https://doi.org/10.1080/14786435.2011.563761).
 3. Khalikov A.R., Sharapov E.A., Valitov V.A., Galieva E.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Simulation of diffusion bonding of different heat resistant nickel-base alloys. *Computation*, 2020, vol. 8, no. 4, pp. 1–12. DOI: [10.3390/computation8040102](https://doi.org/10.3390/computation8040102).
 4. Bahamida S., Fnidiki A., Coisson M., Barrera G., Celegato F., Olivetti E.S., Tiberto P., Laggoun A., Boudissa M. Effect of the Al1 to L1₀ transformation on the structure, magnetic properties of polycrystalline Fe₅₆Pd₄₄ alloy thin films produced by thermal evaporation technique. *Thin Solid Films*, 2018, vol. 668, pp. 9–13. DOI: [10.1016/j.tsf.2018.10.013](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2018.10.013).
 5. Voskoboinikov R. A contribution of L1₀ ordered crystal structure to the high radiation tolerance of γ-TiAl intermetallics. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2019, vol. 460, pp. 92–97. DOI: [10.1016/j.nimb.2019.04.080](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.04.080).
 6. Kumar S., Sharma K., Sharma G., Gupta A., Raghavendra Reddy V., Gome A., Das S.C. Effect of composition on L1₀ ordering, structural and magnetic properties of Fe_{100-x}Pt_x alloy films prepared by controlled sputtering. *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 60, pp. 945–948. DOI: [10.1016/j.matpr.2021.11.222](https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.11.222).
 7. Kohn A., Tal N., Elkayam A., Kovács A., Li D., Wang S., Ghannadzadeh S., Hesjedal T., Ward R.C.C. Structure of epitaxial L1₀-FePt/MgO perpendicular magnetic tunnel junctions. *Applied Physics Letters*, 2013, vol. 102, no. 6, article number 062403. DOI: [10.1063/1.4791576](https://doi.org/10.1063/1.4791576).
 8. Rani P., Kashyap M.K., Singla R., Thakur J., Reshak A.H. Magnetism and magnetocrystalline anisotropy of tetragonally distorted L1₀-FeNi N alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, vol. 835, article number 155325. DOI: [10.1016/j.jallcom.2020.155325](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.155325).
 9. Kozubski R., Kozłowski M., Wrobel J., Wejrzanowski T., Kurzydłowski K.J., Goyhenenx C., Pierron-Bohnes V., Renhofer M., Malinov S. Atomic ordering in nano-layered FePt: Multiscale Monte Carlo simulation. *Computational Materials Science*, 2010, vol. 49, no. 1 SUPPL, pp. S80–S84. DOI: [10.1016/j.commatsci.2010.01.046](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.01.046).
 10. Khromov K.Yu., Pankratov I.R., Vaks V.G. Generalized Ginzburg-Landau theory of antiphase, interphase boundaries in alloys ordered with a single order parameter: B2-, L1₀-type ordering. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2005, vol. 72, no. 9, article number 094207. DOI: [10.1103/PhysRevB.72.094207](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.094207).
 11. Liu Y., Bierbrauer U., Seick C., Weber S.T., Hofherr M., Schmidt N.Y., Albrecht M., Steil D., Mathias S., Schneider H.C., Rethfeld B., Stadtmüller B., Aeschlimann M. Ultrafast magnetization dynamics of Mn-doped L1₀ FePt with spatial inhomogeneity. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2020, vol. 502, article number 166477. DOI: [10.1016/j.jmmm.2020.166477](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166477).
 12. Le Bouar Y., Loiseau A., Finel A. Origin of the complex wetting behavior in Co-Pt alloys. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2003, vol. 68, no. 22, article number 224203. DOI: [10.1103/PhysRevB.68.224203](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.224203).
 13. Mohri T., Ohno M., Chen Y. First-principles calculations of phase equilibria, transformation dynamics of Fe-based alloys. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 2006, vol. 27, no. 1, pp. 47–53. DOI: [10.1361/105497106X92790](https://doi.org/10.1361/105497106X92790).

14. Zhang S., Qi W., Huang B. Size effect on order-disorder transition kinetics of FePt nanoparticles. *Journal of Chemical Physics*, 2014, vol. 140, no. 4, article number 044328. DOI: [10.1063/1.4863350](https://doi.org/10.1063/1.4863350).
15. Khalikov A.R., Sharapov E.A., Korznikova E.A., Potekav A.I., Starostenkov M.D., Galieva E.V., Dmitriev S.V. Monte Carlo Simulation of Diffusion Processes in Three-Component Alloys. *Russian Physics Journal*, 2019, vol. 62, no. 4, pp. 691–697. DOI: [10.1007/s11182-019-01765-1](https://doi.org/10.1007/s11182-019-01765-1).
16. Shcherbinin S.A., Krylova K.A., Chechin G.M., Soboleva E.G., Dmitriev S.V. Delocalized nonlinear vibrational modes in fcc metals. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2022, vol. 104, article number 106039. DOI: [10.1016/j.cnsns.2021.106039](https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2021.106039).
17. Varvaro G., Imperatori P., Laureti S., Cannas C., Ardu A., Plescia P., Capobianchi A. Synthesis of $L1_0$ alloy nanoparticles. potential and versatility of the pre-ordered precursor reduction strategy. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, vol. 846, article number 156156. DOI: [10.1016/j.jallcom.2020.156156](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.156156).
18. Cherednichenko A.I., Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Sysoeva M.O., Eremin A.M. Nonlinear supratransmission in a Pt_3Al crystal at intense external influence. *Computer Research and Modeling*, 2019, vol. 11, no. 1, pp. 109–117. DOI: [10.20537/2076-7633-2019-11-1-109-117](https://doi.org/10.20537/2076-7633-2019-11-1-109-117).
19. Frommen C., Rösner H. Observation of long-period superstructures in chemically synthesised CoPt nanoparticles. *Materials Letters*, 2004, vol. 58, no. 1-2, pp. 123–127. DOI: [10.1016/S0167-577X\(03\)00428-2](https://doi.org/10.1016/S0167-577X(03)00428-2).
20. Khalikov A.R., Iskandarov A.M. Modeling of the Ordering Kinetics of a Binary Alloy via a Vacancy Diffusion Mechanism in the Solid Sphere Model. *Russian Physics Journal*, 2013, vol. 55, no. 12, pp. 1470–1477. DOI: [10.1007/s11182-013-9980-0](https://doi.org/10.1007/s11182-013-9980-0).
21. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V., Ekomasov E.G., Zhou K., Surface discrete breathers in Pt_3Al intermetallic alloy. *Surface Science*, 2019, vol. 679, pp. 1–5. DOI: [10.1016/j.susc.2018.08.011](https://doi.org/10.1016/j.susc.2018.08.011).
22. Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Eremin A.M., Lutsenko I.S., Dmitriev S.V. Excitation of Soliton-Type Waves in Crystals of the A_3B Stoichiometry. *Physics of the Solid State*, 2019, vol. 61, no. 11, pp. 2160–2166. DOI: [10.1134/S1063783419110416](https://doi.org/10.1134/S1063783419110416).
23. Khalikov A.R., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Sharapov E.A., Dmitriev S.V. Structure, energy of planar superstructure defects in X_2YZ Heusler alloys. *Intermetallics*, 2021, vol. 137, article number 107276. DOI: [10.1016/j.intermet.2021.107276](https://doi.org/10.1016/j.intermet.2021.107276).

Planar superstructural defects in the alloys with $L1_0$ superstructure

© 2022

Albert R. Khalikov^{*1,4}, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor
Yuri V. Bebikhov^{2,5}, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor
Elena A. Korznikova^{1,6}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor
Sergey V. Dmitriev^{3,7}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics),
 Professor, leading researcher

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

²Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Mirny (Russia)

³Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa (Russia)

*E-mail: khalikov.albert.r@gmail.com

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3663-784X>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Received 29.04.2022

Accepted 13.09.2022

Abstract: Planar superstructural defects have a great influence on the mechanical, functional properties of binary ordered alloys of the $L1_0$ superstructure based on the fcc lattice, but there is no complete analysis of their structure and energy in the literature. For the $L1_0$ superstructure alloys of the stoichiometric composition AB , the paper gives the expressions for calculating the sublimation energy and the energy of a planar superstructural defect in the model of hard coordination spheres and pair interatomic interactions. The crystal lattice tetragonality was not taken into account. The authors presented the ordered alloy structure as a union of four monoatomic simple cubic lattices, two of which are occupied by A atoms, and the other two by B atoms. This approach allows calculating the sublimation energy required for crystal evaporation. The first eight coordination spheres were taken into account in the work. The paper shows an algorithm for determining all possible geometrically different representations of the $L1_0$ superstructure with the same sublimation energy, gives an expression for finding the planes of occurrence of all possible conservative antiphase boundaries. The study identified that the conservative and nonconservative antiphase boundaries, as well as conservative and nonconservative boundaries of C -domains are observed in the binary ordered alloys of the $L1_0$ superstructure based on the fcc lattice. The algorithms described in this work make it possible to carry out a crystal-geometric analysis of planar defects in both binary and multi-component ordered alloys with various superstructures.

Keywords: planar superstructural defects; $L1_0$ superstructure; C -domains; antiphase boundaries; fcc lattice.

Acknowledgments: The study was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the state assignment of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “USATU” (agreement No. 075-03-2022-318/1) “Youth Research Laboratory of the REC “Metals and

Alloys under the Extreme Conditions” for E.A. Korznikova (calculations), grant NSh-4320.2022.1.2 for E.A. Korznikova (analysis, discussion of the results), grant RSF 21-12-00229 for S.V. Dmitriev (problem setting, research conceptualization).

For citation: Khalikov A.R., Bebikhov Yu.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Planar superstructural defects in the alloys with $L1_0$ superstructure. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 90–98. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-2-90-98.