

# 二维合金系统的有序动力学研究\*

石宏霆 倪 军 顾秉林

(清华大学物理系, 北京 100084)

(2001 年 3 月 8 日收到, 2001 年 4 月 20 日收到修改稿)

采用主方程方法在对概率近似下对三元 fcc 结构晶体在(001)方向的一个层面的有序无序动力学过程进行了研究. 计算了长程序参量(LRO)和短程序参量(SRO)随时间的演化过程. 在系统从完全无序态弛豫到平衡态的过程中存在各种瞬态有序相. 瞬态相有着不同的特点, 如序参量(LRO, SRO)瞬态相曲线形状不同等. 产生它们的原因有不同的原子特征迁移时间、原子间最近邻和次近邻相互作用差异、短程相关性和长程相关性的差异对弛豫过程的影响.

关键词: 对概率近似, 瞬态有序相, 长程序参量(LRO), 长程相关性

PACC: 6460, 6480

## 1 引 言

近年来, 从理论上对晶体的有序无序相转变过程进行研究引起越来越多的关注<sup>[1-9]</sup>. 许多方法<sup>[10-13]</sup>被用于研究各种情况的有序无序转变的动力学过程. 利用快速淬火、激光加工处理、离子束轰击、各种外延生长技术等许多实验方法制备的材料大多是热力学非平衡态和亚稳态材料, 对于这类体系生长过程的把握需要从理论上了解其动力学过程的基本性质.

研究表明, 有些系统在从非平衡态到平衡态的弛豫过程中存在瞬态有序结构<sup>[3-6]</sup>. 二元合金在从非平衡态到相分离的弛豫过程中, 同样发现有有序瞬态产生<sup>[3, 4]</sup>. 在三元系中, 有多重原子迁移特征时间控制着系统演化过程, 有可能存在三组元中的两个先达到一种相对稳定的状态<sup>[5, 6]</sup>, 并保持一段时间. 随着第三组元的迁移, 逐渐达到平衡态, 演化过程中会出现较复杂的现象.

外延生长技术如 MBE、MOCVD 等是分层控制材料生长过程的. 外延生长能够引起不同体系如 III - V 族半导体材料产生有序结构<sup>[14]</sup>. 这种生长通常是在一个基底层面上进行, 因此是一个二维体系的动力学过程<sup>[15, 16]</sup>. 对于如 CuAu 合金和 III - V 族半导体材料, 它的生长面(001)上的有序化可以看成是简

单正方格子上的动力学过程.

## 2 模型与计算方法

本文考虑面心立方合金(001)表面沉积层的有序无序动力学演化过程. 采用随机格子气模型, 体系由合金的两组元(A, B 原子)及空穴组元(C)组成, 体系的哈密顿量为

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha \alpha'} E_{\alpha \alpha'}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) C_i^\alpha C_j^{\alpha'}, \quad (1)$$

变量  $C_i^\alpha$  表示位置  $i$  被  $\alpha$  ( $\alpha = A, B, C$ ) 组元占据的概率.  $\langle ij \rangle$  是对所有近邻位置求和.  $E_{\alpha \alpha'}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  表示  $\mathbf{r}_i$  位置上的  $\alpha$  组元与  $\mathbf{r}_j$  位置上的  $\alpha'$  组元的相互作用能.

本文采用微主方程方法(MEM)<sup>[17, 18]</sup>对体系的有序无序动力学过程进行计算和研究. 在主方程中, 用一系列原子集团概率变量来描述晶体的位形结构. 定义  $P_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n; t)$  代表在  $t$  时刻  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$  这  $n$  个格点上分别被  $\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n$  组元占据的概率. 这些原子集团概率满足正规归一化条件. 在对概率近似中, 体系位形结构可用点概率分布函数  $P_\alpha(\mathbf{r})$  和对概率分布函数  $P_{\alpha_1 \alpha_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  来描述, 其中  $\alpha$  和  $\mathbf{r}$  分别代表组元种类和晶格位置,  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  是邻近的位置矢量. 组元之间的位置交换用  $R_{\alpha_i \alpha_j, \alpha'_i \alpha'_j}(\mathbf{r}_i,$

\* 国家重点基础研究发展规划课题(批准号: G2000067107)和国家自然科学基金(批准号: 19804007)资助的课题.

$r_j, \{x\}$  描述, 它定义了  $r_j$  上的  $\alpha_i$  组元与邻近的  $r_j$  上的  $\alpha_j$  组元在周围位置  $\{x\}$  上是组元  $\{x\}$  情况时的交换速率. 本文只考虑原子与空穴的交换, 即  $\alpha_i$  和  $\alpha_j$  之一是空穴.

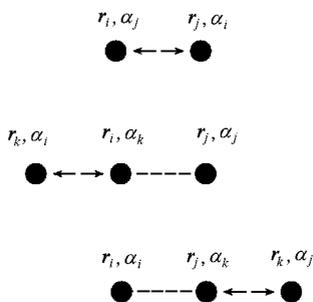


图 1 原子对跃迁示意图( 图为末态可成为  $r_i, \alpha_i, r_j, \alpha_j$  结构的情况)

对概率分布函数的变化由三部分构成, 如图 1, 于是对概率分布函数变化率可由下式给出

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} P_{\alpha_i, \alpha_j}(r_i, r_j, t) \\ &= \sum_{\{x\}} R_{\alpha_j, \alpha_i, \{x\}}(r_i, r_j, \{x\}) P_{\alpha_j, \alpha_i, \{x\}}(r_i, r_j, \{x\}) \\ & - \sum_{\{x\}} R_{\alpha_i, \alpha_j, \{x\}}(r_i, r_j, \{x\}) P_{\alpha_i, \alpha_j, \{x\}}(r_i, r_j, \{x\}) \\ & + P_{\alpha_j}(r_j) \left( \sum_{\substack{\{x\} \\ k \neq j}} R_{\alpha_k, \alpha_i, \{x\}}(r_i, r_k, \{x\}) P_{\alpha_k, \alpha_i, \{x\}}(r_i, r_k, \{x\}) \right. \\ & - \sum_{\substack{\{x\} \\ k \neq j}} R_{\alpha_i, \alpha_k, \{x\}}(r_i, r_k, \{x\}) P_{\alpha_i, \alpha_k, \{x\}}(r_i, r_k, \{x\}) \left. \right) \\ & + P_{\alpha_i}(r_i) \left( \sum_{\substack{\{x\} \\ k \neq i}} R_{\alpha_j, \alpha_k, \{x\}}(r_k, j, \{x\}) P_{\alpha_j, \alpha_k, \{x\}}(r_k, j, \{x\}) \right. \\ & - \sum_{\substack{\{x\} \\ k \neq i}} R_{\alpha_k, \alpha_j, \{x\}}(r_k, r_j, \{x\}) P_{\alpha_k, \alpha_j, \{x\}}(r_k, r_j, \{x\}) \left. \right), \quad (2) \end{aligned}$$

其中  $\sum_{k \neq j}$  表示对  $r_i$  周围近邻的  $r_k$  求和, 并且求和项中不包括  $r_j$ ,  $\sum_{k \neq i}$  表示对  $r_j$  周围近邻的  $r_k$  求和, 并且求和项中不包括  $r_i$ . 在对概率近似模型中, 若考虑最近邻和次近邻相互作用, 则  $R_{\alpha_1, \alpha_2, \{x\}}(r_1, r_2, \{x\})$  依赖于与  $r_1, r_2$  第一、第二近邻的一系列  $\{x\}$  的位形结构. 在本文讨论的系统中, 动力学方程中的  $P_{\alpha_i, \alpha_j, \{x\}}(r_i, r_j, \{x\})$  概率分布函数是由邻近格点上的 10 个点的原子分布情况决定的, 一对原子中的一个原子对应 3 个最近邻 4 个次近邻, 如图 2, 其中 4 个原子与这两个原子分别相邻, 所以  $P_{\alpha_i, \alpha_j, \{x\}}(r_i, r_j, \{x\})$  是包括 12 个点的原子概率分布函数.

12 个点的概率分布函数应由 15 个对概率和 6

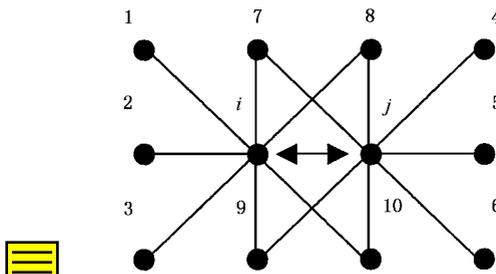


图 2 原子对  $\{ij\}$  与邻近位置原子相互作用示意图

个点的概率分布函数表示如下:

$$\begin{aligned} P_{\alpha_i, \alpha_j, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{10}} &= \frac{P_{\alpha_i, \alpha_j}}{P_{\alpha_i} P_{\alpha_j} P_{\alpha_7} P_{\alpha_8} P_{\alpha_9} P_{\alpha_{10}}} \\ & \cdot P_{\alpha_i, \alpha_1} P_{\alpha_i, \alpha_2} P_{\alpha_i, \alpha_3} P_{\alpha_i, \alpha_7} P_{\alpha_i, \alpha_8} P_{\alpha_i, \alpha_9} P_{\alpha_i, \alpha_{10}} \\ & \cdot P_{\alpha_4, \alpha_j} P_{\alpha_5, \alpha_j} P_{\alpha_6, \alpha_j} P_{\alpha_7, \alpha_j} P_{\alpha_8, \alpha_j} P_{\alpha_9, \alpha_j} P_{\alpha_{10}, \alpha_j}, \quad (3) \end{aligned}$$

其中,  $P_{\alpha_7}, P_{\alpha_8}, P_{\alpha_9}, P_{\alpha_{10}}$  中的  $\alpha_7, \alpha_8, \alpha_9, \alpha_{10}$  与  $\alpha_i, \alpha_j$  均相邻. 把 (3) 式代入 (2) 式, 可以得到封闭的对概率近似下的动力学微分方程组. 点概率和对概率分布函数的关系为

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha_2} P_{\alpha_1, \alpha_2}(r_1, r_2) &= P_{\alpha_1}(r_1), \\ \sum_{\alpha_1} P_{\alpha_1, \alpha_2}(r_1, r_2) &= P_{\alpha_2}(r_2), \quad (4a) \end{aligned}$$

并且满足正规归一化条件

$$\sum_{\alpha} P_{\alpha}(r) = 1. \quad (4b)$$

于是, 点概率和对概率分布函数并非完全独立的. 我们可以从中选出一组独立的函数, 其他所有点概率和对概率分布函数均可由它们通过正规归一化条件 (4) 式得到.

根据 Vineyard<sup>[13]</sup>, 邻近原子间的交换速率由下式给出:

$$R_{\alpha_i, \alpha_j, \{x\}}(r_i, r_j, \{x\}) = \nu \exp\left(-\frac{U}{k_B T} - \frac{\Delta E}{2k_B T}\right), \quad (5)$$

其中,  $\nu$  表示原子交换的跃迁频率,  $U$  是原子交换的平均势垒,  $\Delta E$  是原子交换前后的位形能之差,

$$\Delta E = E_{\alpha'_\alpha} - E_{\alpha\alpha'}, \quad (6)$$

其中,  $E_{\alpha'_\alpha}$  是交换后的位形能,  $E_{\alpha\alpha'}$  是交换前的位形能.

本文研究的对象是面心立方晶体在 (001) 方向的表面沉积层面内原子运动的情况. 如图 3, 该层面为一个简单正方格子, 考虑原子间最近邻和次近邻

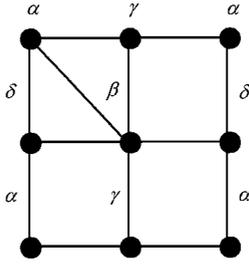


图3 晶格结构示意图,将简单正方格子分为4套子晶格(α,β,γ,δ)

相互作用。为了描述体系的有序相结构,把体系分为4套子晶格(α,β,γ,δ)。在点概率近似中,体系原子的位形结构由  $P_v^s$  决定,它表示子晶格  $S$  ( $=\alpha, \beta, \gamma, \delta$ )上被组元  $\nu$  ( $=A, B, C$ )占据的概率。体系的各种相结构可由下面6个独立的序参量描述:

$$\begin{aligned} \gamma_1^A &= P_A^\alpha + P_A^\beta - P_A^\gamma - P_A^\delta, \\ \gamma_2^A &= P_A^\alpha - P_A^\beta, \gamma_3^A = P_A^\gamma - P_A^\delta, \\ \gamma_1^B &= P_B^\alpha + P_B^\beta - P_B^\gamma - P_B^\delta, \\ \gamma_2^B &= P_B^\alpha - P_B^\beta, \gamma_3^B = P_B^\gamma - P_B^\delta, \end{aligned} \quad (7)$$

序参量  $\gamma_1^A, \gamma_1^B$  描述了  $A, B$  原子在最近邻格子上的分布差异;类似的,  $\gamma_2^A, \gamma_2^B, \gamma_3^A, \gamma_3^B$  显示出原子在次近邻格点上的分布差异。 $C$  组元的分布由正规归一化条件  $\sum_\nu P_\nu^s = 1$  决定。这些序参量可以描述体系中几个具有不同对称性结构的相。它们是:1)  $D: \gamma_i^s = 0$ ; 2)  $O_1: \gamma_1^s \neq 0, \gamma_2^s = \gamma_3^s = 0$ ; 3)  $O_2: \gamma_1^s = 0, \gamma_2^s \neq 0, \gamma_3^s \neq 0$ ; 4)  $O_3: \gamma_i^s \neq 0$ 。

利用上述方法,进一步考虑对概率近似中与对概率分布函数相关的序参量。在本文研究的对象中,有22个独立的对概率分布函数,它们可以用另外10个长程序参量(LRO)和12个短程序参量(SRO)表示。在点概率近似中,没有短程序参量。在对概率近似中,由于考虑到原子之间对的短程相关性影响体系的演化,所以短程序参量对于晶体演化有较大的影响。在(7)式基础上再定义以下4个LRO:

$$\begin{aligned} \gamma_1^P &= P_{AC}^{\alpha\gamma} - P_{CA}^{\alpha\gamma}, \gamma_2^P = P_{AC}^{\beta\delta} - P_{CA}^{\beta\delta}, \\ \gamma_3^P &= P_{AC}^{\beta\gamma} - P_{CA}^{\beta\gamma}, \gamma_4^P = P_{AC}^{\alpha\delta} - P_{CA}^{\alpha\delta}. \end{aligned} \quad (8)$$

(7)(8)式构成10个LRO。定义以下12个SRO:

$$\begin{aligned} \eta_1^{AB} &= P_{AB}^{\alpha\gamma} + P_{BA}^{\alpha\gamma}, \eta_2^{AB} = P_{AB}^{\beta\delta} + P_{BA}^{\beta\delta}, \\ \eta_3^{AB} &= P_{AB}^{\beta\gamma} + P_{BA}^{\beta\gamma}, \eta_4^{AB} = P_{AB}^{\alpha\delta} + P_{BA}^{\alpha\delta}, \\ \eta_1^{AC} &= P_{AC}^{\alpha\gamma} + P_{CA}^{\alpha\gamma}, \eta_2^{AC} = P_{AC}^{\beta\delta} + P_{CA}^{\beta\delta}, \\ \eta_3^{AC} &= P_{AC}^{\beta\gamma} + P_{CA}^{\beta\gamma}, \eta_4^{AC} = P_{AC}^{\alpha\delta} + P_{CA}^{\alpha\delta}, \\ \eta_1^{BC} &= P_{BC}^{\alpha\gamma} + P_{CB}^{\alpha\gamma}, \eta_2^{BC} = P_{BC}^{\beta\delta} + P_{CB}^{\beta\delta}, \\ \eta_3^{BC} &= P_{BC}^{\beta\gamma} + P_{CB}^{\beta\gamma}, \eta_4^{BC} = P_{BC}^{\alpha\delta} + P_{CB}^{\alpha\delta}. \end{aligned} \quad (9)$$

体系能量用原子对之间的相互作用能表示,考虑最近邻、次近邻相互作用  $E_{ij}^{(k)}$  ( $k=1, 2$  分别代表最近邻相互作用能,次近邻相互作用能)表示  $i$  与  $j$  原子在( $k$ )情况下的相互作用能。实际上,方程组仅依赖于最近邻和次近邻交换能<sup>[13]</sup>

$$w_{ij}^{(k)} = -2E_{ij}^{(k)} + E_{ii}^{(k)} + E_{jj}^{(k)}. \quad (10)$$

体系的演化过程由两个特征迁移时间  $\tau_1 = \nu_{AC}^{-1}, \tau_2 = \nu_{BC}^{-1}$  影响。本文通过选取不同的  $\tau_1, \tau_2$  来研究系统的动力学过程。

动力学微分方程组是通过数值计算,利用 Gear's method<sup>[19]</sup>解出,该方法专门用于解刚性微分方程组。系统初始状态选为完全无序状态,在整个动力学演化过程中温度不变。由于系统的涨落,将导致未来系统的有序演化。设LRO初始涨落值为  $10^{-6}$ 。

### 3 计算结果及讨论

图4为平衡相是  $O_3$  时的动力学演化图,系统能量参数为  $E_{AB}^{(1)} = E_{AC}^{(1)} = E_{BC}^{(1)} = -0.2\text{eV}, E_{AB}^{(2)} = E_{AC}^{(2)} = E_{BC}^{(2)} = -0.4\text{eV}, E_{AA}^{(1)} = E_{BB}^{(1)} = E_{CC}^{(1)} = 0.0\text{eV}, E_{AA}^{(2)} = E_{BB}^{(2)} = E_{CC}^{(2)} = 0.0\text{eV}, \tau_1/\tau_2 = 10^{-4}$  图4(a)-(b)为LRO演化图。在从完全无序相到平衡有序相的演化路径中,系统经历了瞬态有序相  $O_2$ 。系统动力学过程经历了两个阶段,第一阶段为无序相到瞬态有序相  $O_2$  的过程;第二阶段为瞬态有序相  $O_2$  演化为  $O_3$  平衡态的过程。在第一阶段,因为  $A-C$  交换比较快,所以  $\gamma_i^A$  先进入有序状态,经过一段时间后,  $B-C$  交换显著起来,  $\gamma_i^B$  也进入有序状态,它的变化带动了此前相对稳定的  $A$ , 使  $\gamma_i^A$  进一步变化,最终  $A, B$  原子弛豫到稳定的平衡态  $O_3$ 。  $A$  原子明显有序化出现在大约  $10^6-10^7$ ,  $B$  原子在  $10^9-10^{10}$  有明显有序结构,时间差异基本符合它们的特征迁移时间的差别。图4(d)-(f)为系统SRO演化图。在  $10^6-10^7$  和  $10^9-10^{10}$  两个时间附近, SRO有剧烈变化,恰好是系统进入  $O_2$  和  $O_3$  态的时刻,说明这时原子的交换运动比较显著。从图中还可以看到SRO在第一次显著变化时情况比较简单,而第二次比较复杂,这是因为第一次变化主要是由于  $A$  原子迁移引起的,而第二次变化是由  $B$  原子引起,并带动  $A$  原子共同协调迁移的结果,所以情况复杂一些。以  $\eta_1$  为例讨论一下SRO的变化过程。  $\eta_1^{BC}$  从初态变到  $O_2$  态是发生在  $10^6-10^7$ , 这时  $B$  原子基本还在原先位置,而  $\eta_1^{BC}$  却

变为 0, 说明  $B$  邻近的  $C$  基本被  $A$  取代, 导致  $\eta_1^{AB}$  增加; 当系统进入  $O_3$  态时,  $\eta_1^{AB}$  也变为 0, 说明  $A$  邻近的  $B$  基本被  $C$  取代, 导致  $\eta_1^{AC}$  增加, 并且可以看出两者均增加到 0.4 左右.

下面讨论平衡态为有序相  $O_1$  时体系的动力学演化. 能量参量取为  $E_{AA}^{(1)} = E_{BB}^{(1)} = E_{CC}^{(1)} = 0.0\text{eV}$ ,  $E_{AA}^{(2)} = E_{BB}^{(2)} = E_{CC}^{(2)} = 0.0\text{eV}$ ,  $E_{AB}^{(1)} = E_{AC}^{(1)} = E_{BC}^{(1)} = -0.8\text{eV}$ ,  $E_{AB}^{(2)} = E_{BC}^{(2)} = E_{AC}^{(2)} = 0.0\text{eV}$ , 温度是  $k_B T = 0.5\text{eV}$ . 图 5 为  $A, B$  原子特征迁移时间一样的情况, 这时  $\gamma_i^A$ ,

$\gamma_i^B$  序参量曲线完全相同. 图中 LRO 没有瞬时有序相, LRO 与 SRO 在达到平衡态前几乎同时发生显著变化, 而 SRO 在此前大约  $10^2 - 10^4$  时间内已发生变化, 说明系统在局域已经趋于一定的有序性. 图 6 为  $A, B$  原子特征迁移时间比  $\tau_1/\tau_2 = 10^3$  的情况. 在  $B$  原子已经有序化后,  $A$  原子逐渐进入有序结构, 且速度不及  $B$ , 因为  $B$  有较大的迁移速率, 但这种差别还不足以使系统产生稳定的瞬态有序相, 所以图中只显示出一个峰. SRO 在 LRO 有序化之前先发生变

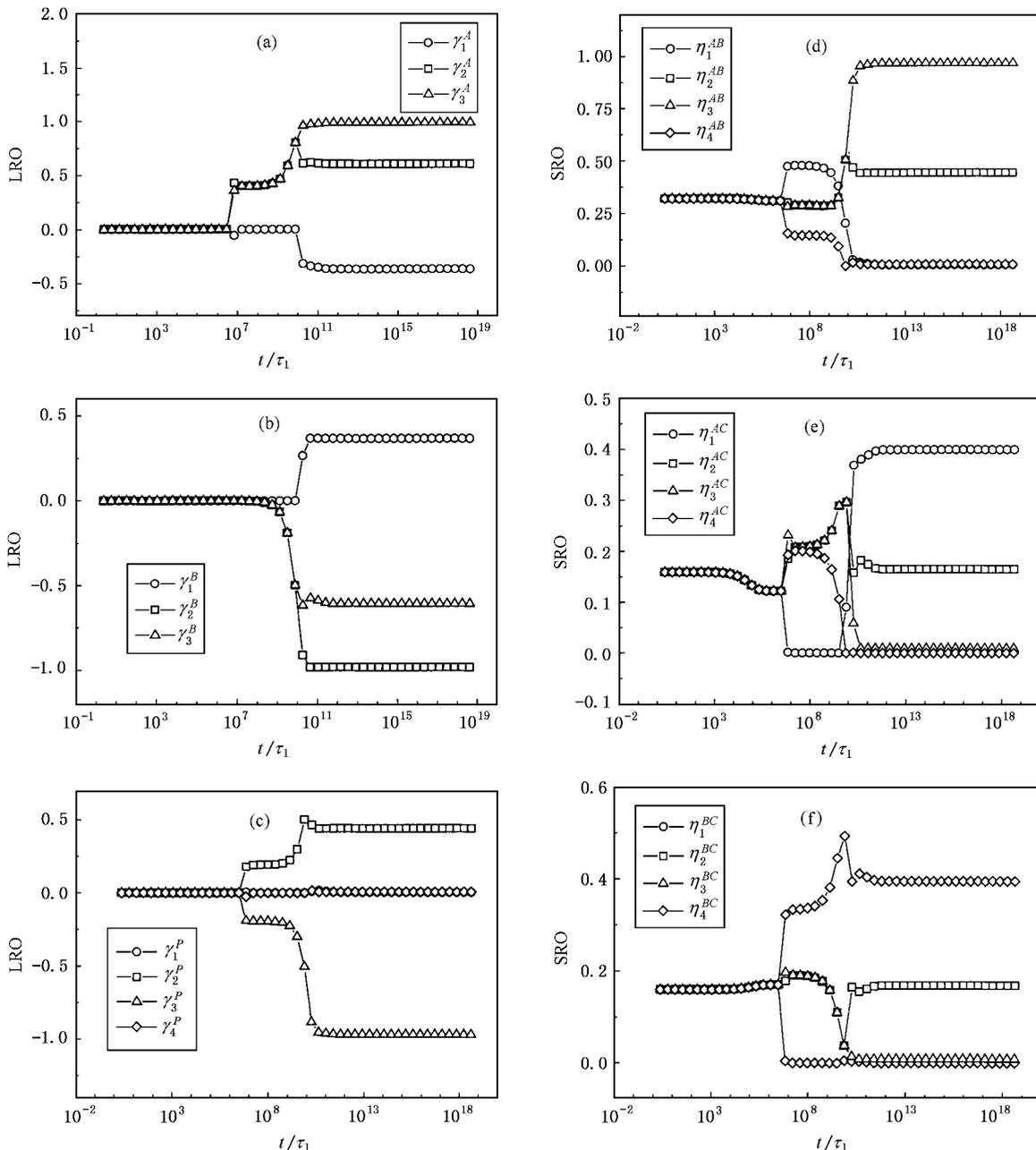


图 4 系统 LRO 和 SRO 序参量演化图 系统组分  $x_A = 0.4, x_B = 0.4$  特征迁移时间  $\tau_1 = 1, \tau_2 = 10^4$ , 系统温度  $k_B T = 0.15\text{eV}$

化.以  $\eta_1, \gamma_1$  为例,可以看到,  $\gamma_1$  在  $10^3-10^4$  附近剧变,而  $\eta_1$  一开始就有明显变化,由于  $B$  迁移快,可以明显看出  $\eta_1^{BC}$  比  $\eta_1^{AC}$  快许多,并且  $\eta_1^{BC}$  达到一个极大值,此后随着  $A$  原子的迁移又进行位形重调,  $\eta_1^{BC}$  有所减小.在 LRO 剧变时 SRO 产生第二次明显变化.计算表明,增加原子特征迁移时间比, LRO 演化过程与图 6 类似,但 LRO 瞬态有序相持续稳定时间加长,而 SRO 在 LRO 剧变前后的有序稳定区域也会加大.对比图 5 和图 6,可以看到平衡态结果相同,

所以特征迁移时间的差别不影响平衡相图,只影响动力学演化过程.平衡相图是由体系最终的自由能决定的.

图 7 为平衡相图在  $k_B T = 0.665\text{eV}$  温度下为无序状态的情况,但 SRO 表现出一定的有序性.系统演化过程中出现  $O_1$  瞬态.从图中可以看出这主要是迁移速率较大的  $B$  原子的贡献,而  $A$  原子变化较小,这点与低温情况类似.由于系统温度较高,系统最终进入无序状态.

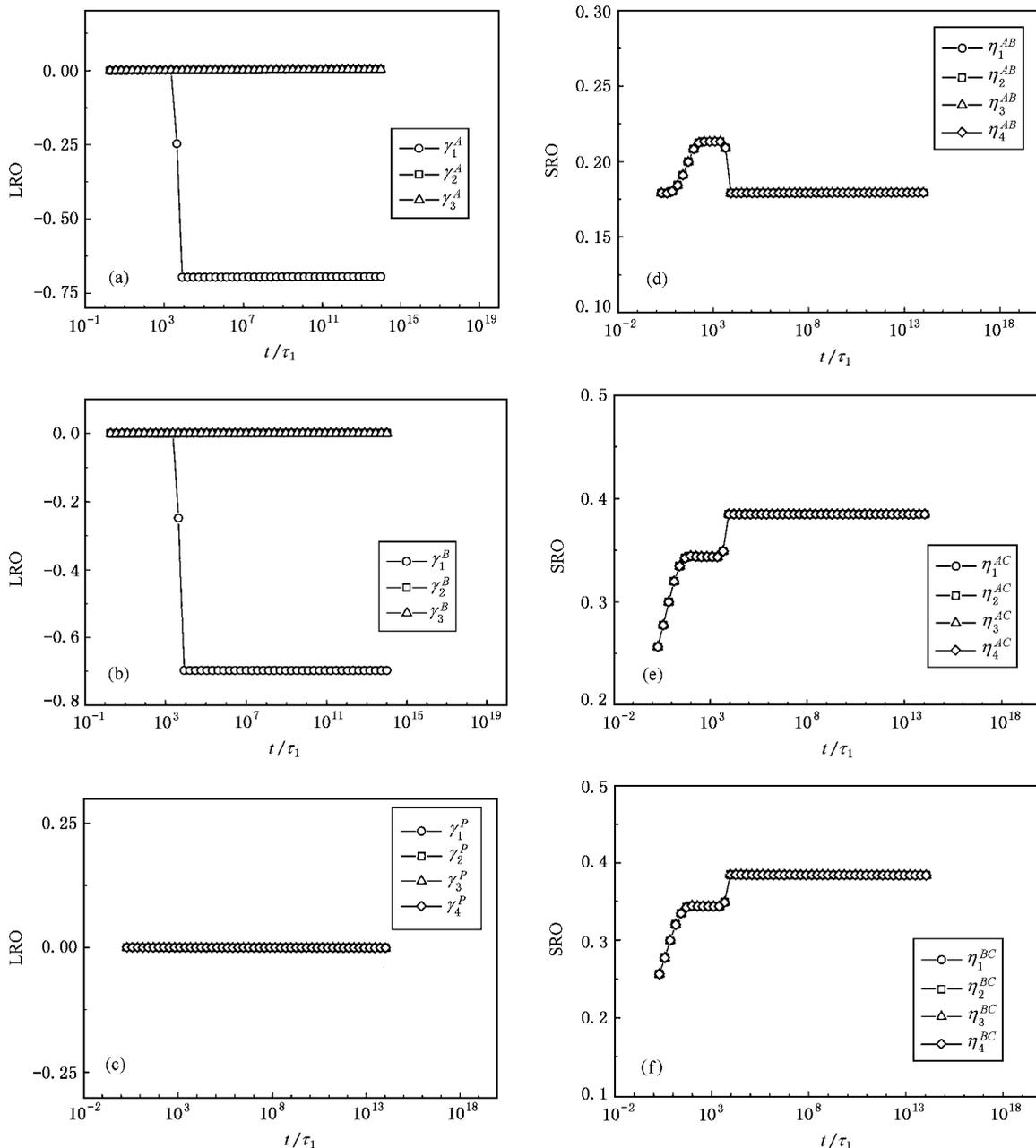


图 5 系统 LRO 和 SRO 序参量演化图 系统组分  $x_A = 0.3, x_B = 0.3$  特征迁移时间  $\tau_1 = 1, \tau_2 = 1$ , 系统温度  $k_B T = 0.5\text{eV}$

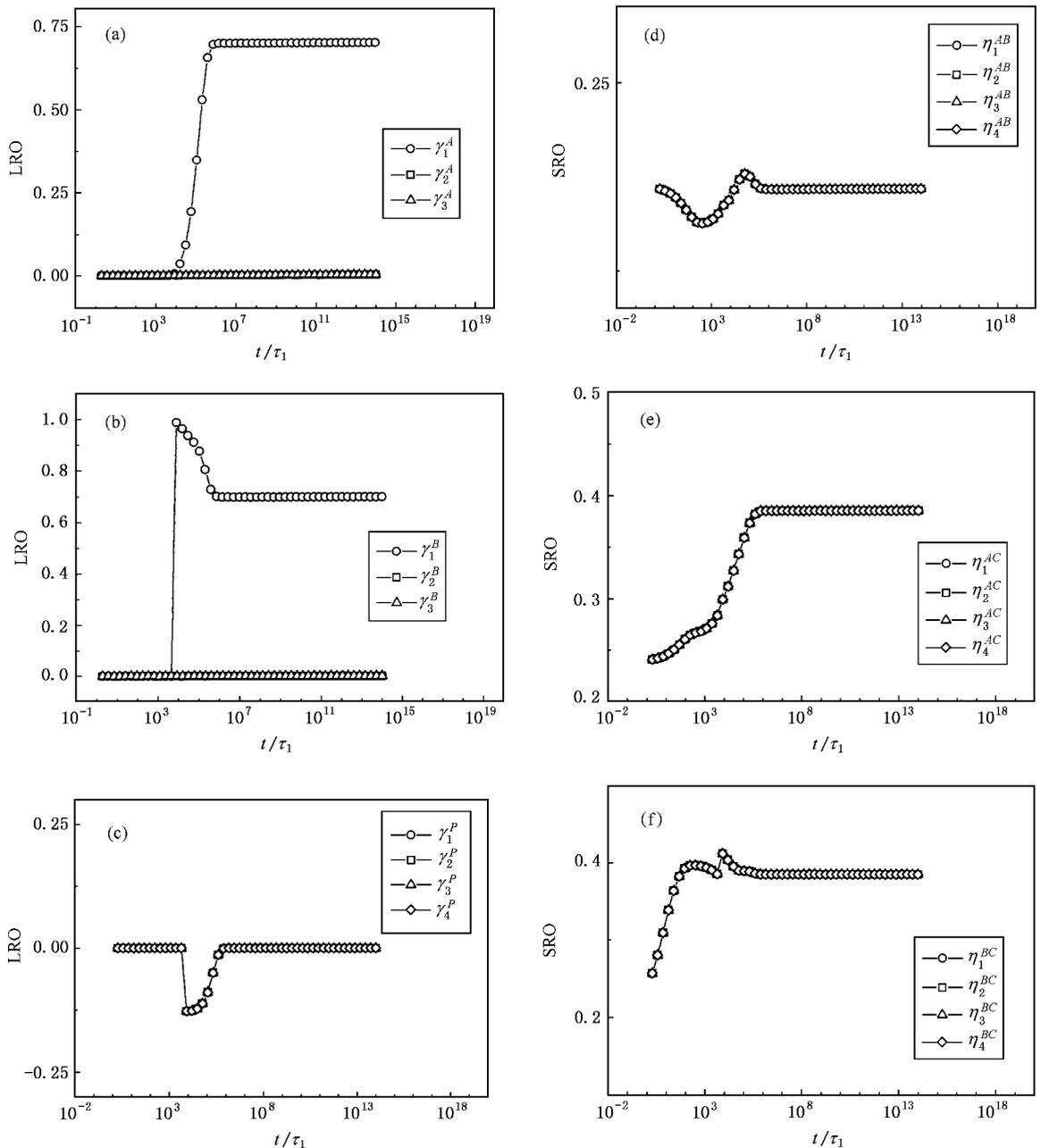


图6 系统 LRO 和 SRO 序参量演化图 系统组分  $x_A = 0.3$ ,  $x_B = 0.3$  特征迁移时间  $\tau_1 = 1$ ,  $\tau_2 = 10^{-3}$ , 系统温度  $k_B T = 0.5eV$

通过选取不同参数进行计算,将所得结果进行比较,发现在次近邻相互作用弱于最近邻相互作用时,体系在一个较大温度范围内存在  $O_1$  有序瞬态,而平衡态则随着温度升高从  $O_1$  转变到无序态.通常迁移较快的组元在产生  $O_1$  瞬态时有一个峰,表明由该组元产生的有序度会高于最后平衡时的有序度. SRO 在 LRO 有剧烈变化之前一般就有明显变化,这是因为短程相关性影响体系局域有序性,而长程相关性影响整个体系,这造成原子在局部产生有

序结构所需的弛豫时间较短,而大尺度上的有序性要延迟一段时间才能发生.对于次近邻相互作用强于最近邻相互作用的情况,系统将会经历  $O_2$  瞬态,然后弛豫到平衡的  $O_2$  或  $O_3$  态,瞬态有序相稳定持续的时间或峰的宽度,与  $A, B$  原子特征迁移时间的比值有密切关系.

## 4 结 论

本文研究了三元面心立方结构系统在(001)方

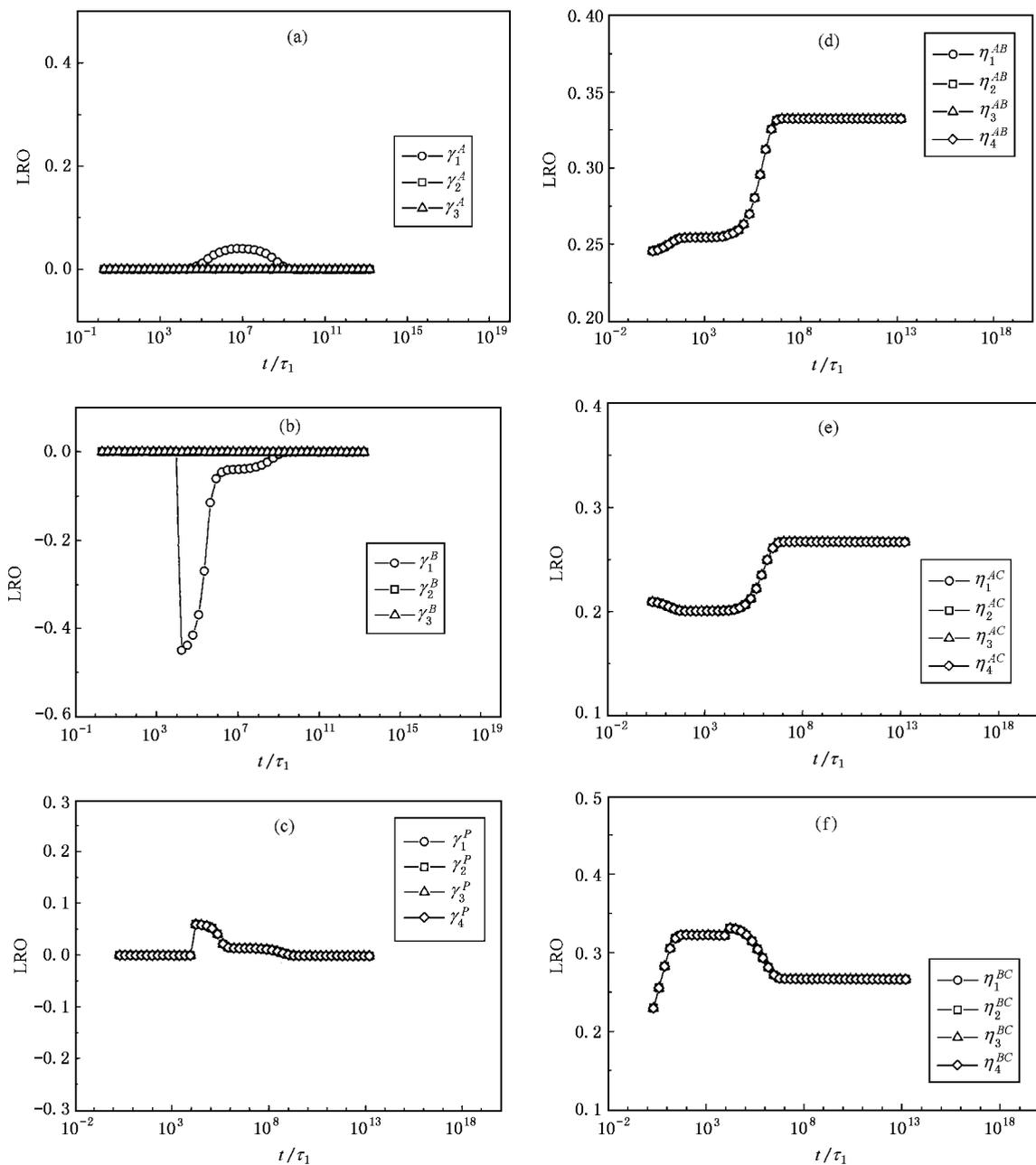


图 7 系统 LRO 和 SRO 序参量演化图 系统组分  $x_A = 0.35, x_B = 0.35$  特征迁移时间  $\tau_1 = 1, \tau_2 = 10^{-5}$  系统温度  $k_B T = 0.665\text{eV}$

向的表面沉积层的有序无序动力学过程,采用对概率近似下的微主方程方法进行模拟计算.从计算的有序无序动力学路径结果中可以得到系统演化过程中出现的各种瞬态有序相,并对其特点进行了讨论.

对于从完全无序态到  $O_3$  态的弛豫过程,系统的次近邻相互作用强于最近邻相互作用,演化过程分为两个阶段.第一阶段从完全无序到  $O_2$  有序瞬态,第二阶段从  $O_2$  到  $O_3$  平衡态.这是由于  $A, B$  两原子的特征迁移速率不同.

对于平衡态是  $O_1$  的情况,体系演化动力学过程中 LRO 存在峰,表明有序度曾达到极值,然后又返回,这也是由于原子的特征迁移速率不同造成的.随着温度升高,体系的平衡态从  $O_1$  转变到无序,而体系在一个较大温度范围内存在有序瞬态.

对于 SRO 的动力学演化,其变化幅度通常不及 LRO.但 LRO 有剧烈变化时, SRO 也有相对较明显的变化,所以 LRO 对应瞬态有序相时, SRO 通常也表现出瞬态有序相的弛豫峰. SRO 在 LRO 无明显变化

之前,可能就有较明显的变化,这是 SRO 与 LRO 的空间尺度相关性不同造成的时间差异.

- 
- [ 1 ] B. Fultz , *J. Mater. Res.* , **5** ( 1990 ) 1419 ; **7** ( 1992 ) , 946. 5006.
- [ 2 ] J. R. Smith , Jr. , A. Zangwill , *Surf. Sci.* , **316** ( 1994 ) , 359. [ 13 ] G. H. Vineyard , *Phys. Rev.* , **102** ( 1956 ) , 981.
- [ 3 ] L. Q. Chen , A. G. Khachaturyan , *Phys. Rev.* , **B44** ( 1991 ) , 4681. [ 14 ] G. B. Stringfellow , G. S. Chen , *J. Vac. Sci. Technol.* , **B9** ( 1991 ) , 2182.
- [ 4 ] L. Reinhard , P. E. A. Turchi , *Phys. Rev. Lett.* , **72** ( 1994 ) , 120. [ 15 ] J. E. Bernard , S. Froyen , A. Zunger , *Phys. Rev.* , **B44** , ( 1991 ) , 11178.
- [ 5 ] J. Ni , B. L. Gu , *Phys. Rev. Lett.* , **79** ( 1997 ) , 3922. [ 16 ] B. L. Gu , Z. F. Huang , J. Ni , J. Z. Yu , K. Ohno , Y. Kawazoe , *Phys. Rev.* , **B51** ( 1995 ) , 7104.
- [ 6 ] J. Ni , B. L. Gu , *Phys. Rev.* , **B61** ( 2000 ) , 8598. [ 17 ] L. Q. Chen , J. A. Simmons , *Acta Metall. Master.* , **42** ( 1994 ) , 2943.
- [ 7 ] M. Plapp , J. F. Gouyet , *Phys. Rev. Lett.* , **78** ( 1997 ) , 4970. [ 18 ] A. S. Bakai , M. P. Fateev , *Phys. Status Solidi* , **B158** ( 1990 ) , 81.
- [ 8 ] L. Q. Chen , *Phys. Rev.* , **B58** ( 1998 ) , 5266. [ 19 ] W. C. Gear , *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations* ( Prentice-Hall , Englewood Cliffs , NJ , 1971 ).
- [ 9 ] S. H. Cai , L. Hu , L. J. Dai , S. Y. Ji , J. S. Li , D. X. Zhang , *Chin. Phys.* , **9** ( 2000 ) , 450.
- [ 10 ] S. M. Allen , J. W. Chan , *Acta Metall.* **27** ( 1979 ) , 1085.
- [ 11 ] H. Sato , R. Kikuchi , *Acta Metall.* , **24** ( 1976 ) , 797.
- [ 12 ] K. Gschwend , H. Sato , R. Kikuchi , *J. Chem. Phys.* , **69** ( 1978 ) ,

# KINETICS OF ORDERING FOR AN ALLOY SYSTEM IN A TWO-DIMENSIONAL LATTICE\*

SHI HONG-TING NI JUN GU BING-LIN

( *Department of Physics , Tsinghua University , Beijing , 100084 , China* )

( Received 8 March 2001 ; revised manuscript received 20 April 2001 )

## ABSTRACT

The kinetics of ordering in a (001) deposition monolayer in fcc alloy system is investigated by means of the micromaster equation method in the pair approximation. The time evolutions of the long-range order (LRO) and short-range order (SRO) parameters are calculated. There are transient ordered states during the relaxation from the disordered state to the equilibrium state. The transient ordered states have various features are due to different characteristic times for the atomic migration, the different first- and second-nearest-neighbors interactions, the different influence of short-range correlation and long-range correlation on relaxation.

**Keywords** : the pair approximation , transient ordered state , long-range order , long-range correlation

**PACC** : 6460 , 6480

---

\* Project supported by the National Key Program of Basic Research Development of China ( Grant No. G2000067107 ) and by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 19804007 ).