

Динамическое торможение краудионных комплексов

Маркидонов А.В.¹, Старостенков М.Д.², Неверова Т.И.³, Барчук А.А.^{3,†}

¹markidonov_artem@mail.ru; ²genphys@mail.ru; ³valery@zaoproxy.ru; ^{3,†}lexa.bar4uk@yandex.ru

¹Филиал Кузбасского государственного технического университета, ул.Орджоникидзе 8, 654000 Новокузнецк

²Алтайский государственный технический университет, пр-т. Ленина 46, 656038 Барнаул

³Кузбасская государственная педагогическая академия, пр-т Пионерский 13, 654027 Новокузнецк

Dynamic braking of crowdion complexes

A.V. Markidonov¹, M.D. Starostenkov², T.I. Neverova³, A.A. Barchuk³

¹Branch of the Kuzbass State Technical University, Ordzhonikidze St. 8, 654000 Novokuznetsk

²Altai State Technical University, Lenin Ave. 46, 656038 Barnaul

³Kuzbass State Pedagogical Academy, Pioneer Ave. 13, 654027 Novokuznetsk

Методом молекулярной динамики исследуется движение объемных и плоских краудионных комплексов в ГЦК кристаллах. Показано, что при различных скоростях движения имеют место разные динамические эффекты, связанные с взаимодействием краудиона и фононной подсистемы кристалла.

Ключевые слова: краудион, фононное трение, молекулярная динамика

By means of molecular dynamics simulations motion of two- and three-dimensional crowdion complexes in fcc metals is studied. It is demonstrated that at various speeds of crowdion complexes different dynamical effects related to their interaction with phonon sub-system are observed.

Keywords: crowdion, phonon friction, molecular dynamics

1. Введение

В настоящее время межузельный механизм массопереноса при пластическом деформировании кристаллических материалов рассматривается наряду с вакансионным и дислокационным механизмом [1-4]. Немаловажную роль здесь играют краудионы – специфические конфигурации межузельного атома, обладающие высокой подвижностью благодаря низкому потенциальному барьеру, разделяющего равновесные положения дефекта. Для краудионов свойственно стремление к агрегатизации, что способствует выигрышу энергии. Кроме этого, кластеры из нескольких межузельных атомов, а также дислокационные петли, в процессе релаксации кристалла также образуют краудионные комплексы [5,6]. Еще одним возможным механизмом образования подобных объединений краудионов, является взаимодействие кооперативных атомных смещений, представляющих собой продольную волну и возникающих при внешнем воздействии на структуру, с кластерами межузельных атомов [7].

Кроме сказанного выше, краудионы играют важную роль в процессах диффузии, динамике и кинетике радиационных дефектов. В связи с этим, данные конфигурации межузельного атома вызывают несомненный интерес. Одиночные краудионы, как правило, исследуются в рамках модели Френкеля –

Конторовой [8-10], а вот их агрегаты изучены еще недостаточно. В [11] введены термины для обозначения подобного рода объединений: плоский и объемный краудионный комплекс. Под плоским комплексом подразумевается объединение нескольких краудионов, расположенных в одной атомной плоскости. Объемным же комплексом называются краудионы, расположенные в соседних плоскостях. В работе [11] проведено тщательное исследование подобных статичных конфигураций, показано, что объемный комплекс обладает меньшей энергией образования.

Настоящая статья посвящена изучению динамики краудионных комплексов в кристаллах.

2. Описание модели

Эксперимент проводился на расчетном блоке, имитирующем трехмерный кристалл с ГЦК решеткой, состоящем из 30000 атомов. Взаимодействие между атомами описывалось с помощью парного потенциала Морзе:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2), \quad (1)$$

где D – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, $\beta = e^{\alpha r_0}$, r_0 – некоторое

усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами. Взаимодействие между атомами ограничивалось пятью первыми координационными сферами [12].

Температура расчетной ячейки задавалась через начальные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла. Направление скоростей задавалось случайно, но с условием, чтобы суммарный импульс атомов равнялся нулю:

$$|v_i| = v_{KB} \sqrt{2} = \sqrt{\frac{6kT}{m_i}}, \quad \sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i = 0, \quad (2)$$

где v_{KB} – среднеквадратичная скорость атома, k – постоянная Больцмана, T – температура, m_i – масса i -го атома, N – число атомов в расчетной ячейке.

Компьютерный эксперимент выполнялся по методу молекулярной динамики с использованием программы [13]. За пределами расчетный блок повторялся введением периодических граничных условий. Время одной итерации равнялось 10^{-14} с.

Вначале эксперимента в соответствующие плотноупакованные ряды расчетного блока внедрялись межузельные атомы, при этом соседние атомы перемещались из своих первоначальных положений равновесия. После конструирования расчетного блока, он охлаждался в течение нескольких пикосекунд. Таким образом, в кристалле создавались краудионные комплексы.

Известно, что краудионы могут приходить в движение за счет полей напряжений, создаваемых в кристалле при деформации структуры. В данной работе неоднородное деформирование не применялось, в связи с возможной нестабильностью расчетного блока. Скорость краудионам изначально присваивалась на старте эксперимента. Затем включалась процедура релаксации системы, посредством разогрева возле 0 К. Через определенные интервалы времени фиксировалось изменение структуры кристалла, происходящее в процессе релаксации без диссипации энергии за пределы расчетного блока.

Основным визуализатором динамики структуры в работе являлся визуализатор атомных смещений из на-

чальных положений. В случае выбранного единичного масштаба, смещения изображались в виде отрезков соединяющих начальное и конечное положение атомов.

3. Результаты моделирования

Исследование проводилось с комплексами, состоящими из четырех краудионов (рис.1). Рассматривалась как плоская, так и объемная конфигурация дефектов.

Подобного рода объединения межузельного атома являются достаточно устойчивыми конфигурациями к различным температурным и скоростным режимам. Так распад комплекса на отдельные краудионы наблюдается при температурах близких к температурам плавления материала, а распад вызванный скоростью движения вообще не наблюдался в экспериментах. Благодаря этому, а также в связи с возможностью движения краудионов со скоростями, превышающими скорость звука в кристалле, можно исследовать динамику комплексов в достаточно широком диапазоне скоростей и температур.

На первом этапе исследования была изучена скорость движения комплексов. Для этого в расчетном блоке, на некотором расстоянии от центра дефектов, создавались вакансии. После старта эксперимента, определялось время аннигиляции вакансий и избыточных атомов, по которому можно было судить о скорости перемещения краудионных комплексов. Так на рис.2. представлены результаты описанного выше эксперимента. Исследование проводилось на расчетном блоке, имитирующем кристалл чистого алюминия. Расстояние между вакансиями и центрами краудионов равнялось двенадцати межатомным расстояниям.

Очевидно, что при увеличении начальной скорости, комплексы движутся в кристалле быстрее. Из рисунка 2 видно, что скорость объемных комплексов превышает скорость плоских, но в случае, если начальная скорость выше скорости звука, это различие уменьшается, и в итоге практически исчезает. Еще одной особенностью, является тот факт, что при движении с до- и сверхзвуковыми скоростями, динамика краудионного комплекса, по-видимому, подчиняется различным уравнениям движения. Для подтверждения этого, необходимо дополнительное исследование, которое бы показало, что от-

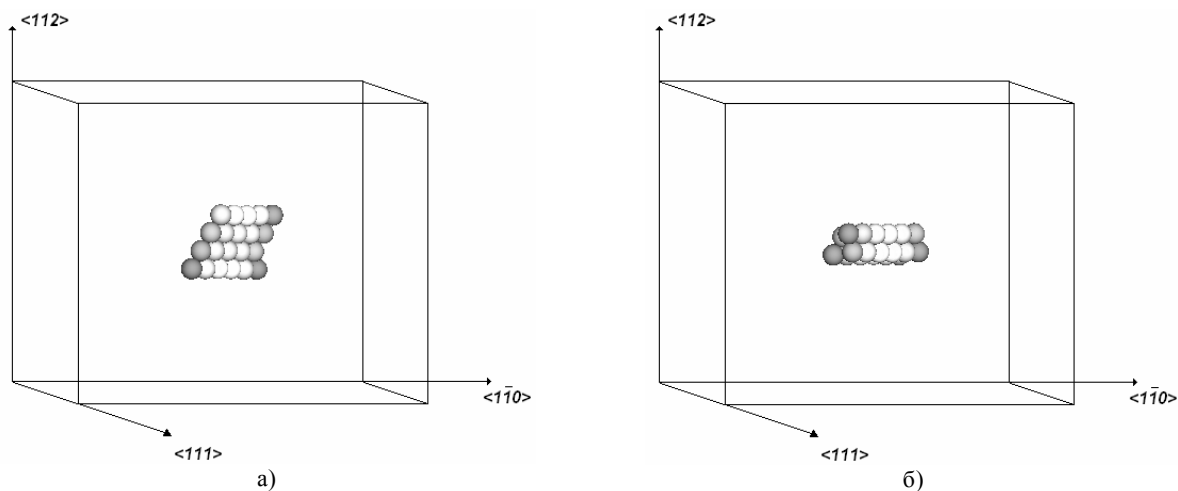


Рис.1. Фрагмент расчетного блока с плоским (а) и объемным (б) краудионным комплексом

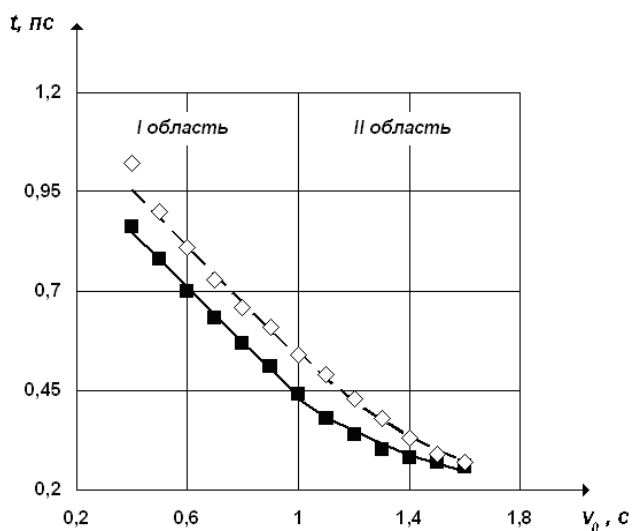


Рис. 2. Зависимость времени аннигиляции вакансий и краудионов от начальной скорости (c – скорость распространения звуковых волн в данном материале) плоского (\diamond) и объемного комплекса (\blacksquare), аппроксимированная кусочно-заданной функцией.

клонения значений, приведенных на рис. 2, от линейной зависимости являются значимыми, и их аппроксимация при помощи уравнения прямой невозможна.

В данном случае можно использовать регрессионный анализ [14,15]. Тогда по данным эксперимента необходимо построить уравнение регрессии, и оценить его статистическую значимость. Для построения используется метод наименьших квадратов, суть которого заключается в нахождении параметров уравнения таким образом, чтобы квадрат разности между фактическими и теоретическими значениями был минимален. После определения параметров уравнения, оценивается средняя ошибка аппроксимации, которая не должна превышать 10%.

Вычисления показали, что при построении линейного уравнения регрессии по данным эксперимента на рис.2, средняя ошибка составляет 14 и 17% для плоского и объемного комплекса соответственно. Данный результат подтверждает, что отклонения зависимости при сверхзвуковых скоростях на рис.2 является существенными, и график не может быть представлен линейной зависимостью.

В случае если уравнение регрессии представить в виде гиперболической функции, ошибки аппроксимации составляют 15 и 10%, что также не является удовлетворительным результатом.

Поэтому, в данном случае, лучше, на наш взгляд, все поле значений разбить на две части, и для каждой в отдельности построить свое уравнение, которое описывало бы зависимость времени аннигиляции вакансий и краудиона от начальной скорости комплекса, т.е. аппроксимировать полученные данные с помощью кусочно-заданной функции. Для проверки справедливости такого решения можно использовать хорошо известный в статистике тест Чоу [16], согласно которому нулевая гипотеза о том, что две выборки являются частями одной объединенной выборки, отвергается при определенном уровне значимости, в случае если величина,

включающая суммы квадратов остаточных величин регрессии, превышает некоторое пороговое значение. Расчеты показали, что подобное разбиение поля значений возможно, если оно представляется в виде двух областей с дозвуковой и сверхзвуковой скоростью движения комплексов (см. рис. 2). При этом первая область аппроксимируется линейной функцией, а вторая – гиперболической.

Стоит оговорить, что при аппроксимации зависимости для плоского комплекса, удовлетворительного результата удалось получить только после исключения из рассмотрения самого первого значения эксперимента, которое значительно больше остальных. Объяснить такое отклонение можно следующим образом. Краудион находится в периодическом поле атомов соседних рядов. При объединении краудионов в комплекс, энергия связи отдельного краудиона с соседними рядами уменьшается, так как по соседству будет располагаться другой краудион. При низком значении начальной скорости, кинетической энергии комплекса не достаточно для мгновенного преодоления потенциального барьера, и он смещается не сразу, а через некоторое время благодаря термофлуктуационным механизмам. Поэтому для плоского комплекса наблюдается завышенное значение времени аннигиляции при самом низком значении скорости, так как поправка на время старта комплекса не делалась. Для объемного комплекса, по-видимому, этого значения энергии достаточно в связи с особенностями его конфигурации, так как каждый краудион окружен двумя соседними, и энергия связи комплекса в целом с кристаллической матрицей является ниже, чем для плоского.

Таким образом, исследование показывает, что существует два механизма торможения краудионов в кристаллах, каждый из которых действует при определенном скоростном режиме. В данном случае можно дать следующее объяснение. Движение краудиона связано с преодолением барьеров, связанных с периодическим строением кристалла. Известно, что упругая деформация, создаваемая центром краудиона, в основном затрагивает атомы того ряда, в котором расположен краудион, и тем самым энергия активации его миграции в данном плотноупакованном ряду невелика. Тем не менее, несмотря на то, что энергия связи с атомами соседних рядов мала, полностью исключить ее нельзя. При движении краудиона, его упругое поле возмущает равновесие фононного газа, в результате чего осуществляется отток энергии от краудиона к фононам и возникает эффективное торможение. Данному процессу соответствует первая область разбиения на рис. 2. При увеличении скорости краудиона до скорости звуковых волн и выше, его кинетическая энергия достигает высоты потенциальных барьеров, при этом взаимодействие с фононами уменьшается, и краудион движется практически без потерь энергии. В данном случае имеет место фокусировка атомных столкновений [17]. Этому процессу соответствует вторая область на рис. 2.

Представление зависимости времени аннигиляции вакансий и избыточных атомов от начальной скорости краудионов в виде кусочно-заданной функции остается справедливым и для других ГЦК металлов (см. рис. 3).

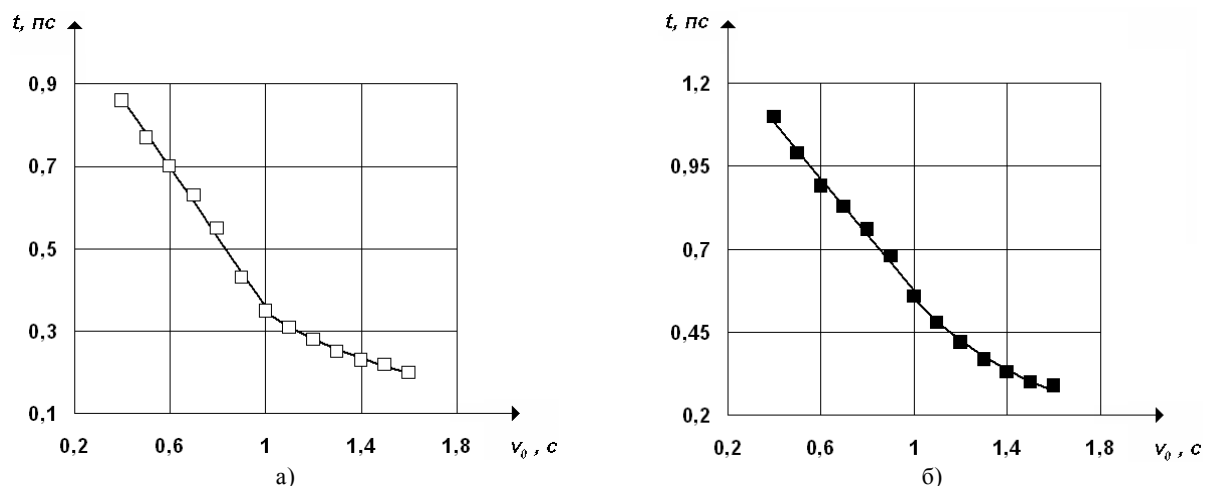


Рис. 3. Зависимость времени аннигиляции вакансий и межузельных атомов, от начальной скорости краудионов (v_0 – скорость распространения звуковых волн в данном материале) для никеля (а) и меди (б).

Графики, представленные ниже, отображают результаты экспериментов с объемными краудионными комплексами, в связи с тем, что в данном случае наблюдается меньшая погрешность. Оговорим, что в данном и последующих рисунках области разбиения не подписаны во избежание загромождения изображения.

Если проводить аналогию с дислокациями, то поле краудиона при движении должно порождать упругую волну [18,19]. На рис. 4, представлена подобная волна, создаваемая краудионным комплексом при различной скорости движения.

Следует оговорить, что при построении рис. 4 использовалась обрезка смещений, и поэтому наибольшие смещения, связанные с перемещением самого комплекса, не показаны. Из рисунка видно, что при низкой скорости движения краудионного агрегата большая часть атомных смещений сонаправлена с ним. В случае же, если скорость комплекса превышает скорость звука (для Al $c = 5105$ м/с), смещения в данном направлении создаются в гораздо меньшей степени. При дальнейшем протекании эксперимента движущийся комплекс будет располагаться на одном уровне с фронтом создаваемой волны. Таким образом, эффект «фононной вязкости»

при сверхзвуковом движении краудионного комплекса будет практически не заметен.

Также необходимо рассмотреть еще один эксперимент. Если при сверхзвуковых скоростях движения комплекса его взаимодействие с фононной подсистемой кристалла уменьшается, то тогда повышение температуры должно незначительно сказываться на скорости краудиона. Для подтверждения этого предположения была исследована динамика краудионного комплекса при различных температурных режимах (см. рис. 5).

Чтобы не загромождать изображение, на рисунке не отображены соединительные линии. Из рис.5 видно, что при увеличении скорости краудионных комплексов разница между различными температурными режимами уменьшается, а при сверхзвуковых скоростях практически исчезает. Стоит оговорить, что из-за термофлуктуационных процессов строго линейную зависимость в первой области получить не удалось, но, тем не менее, вывод о возможности разбиения поля значений на две области в данном случае вполне уместен.

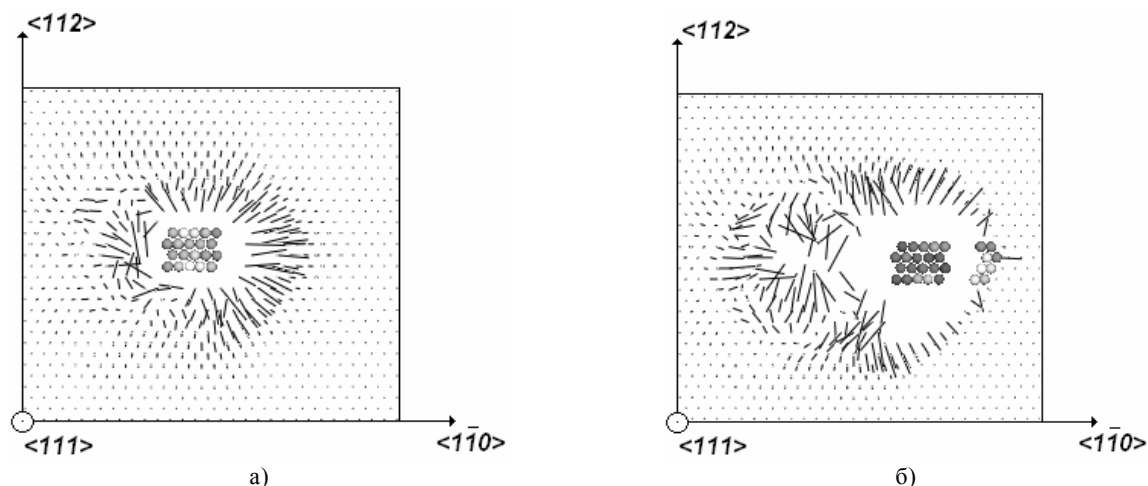


Рис. 4. Атомные смещения, создаваемые краудионным комплексом, движущимся со скоростью $2 \cdot 10^3$ (а) и $8 \cdot 10^3$ (б) м/с, через 0.3 пс после начала эксперимента. Смещения увеличены в 100 раз.

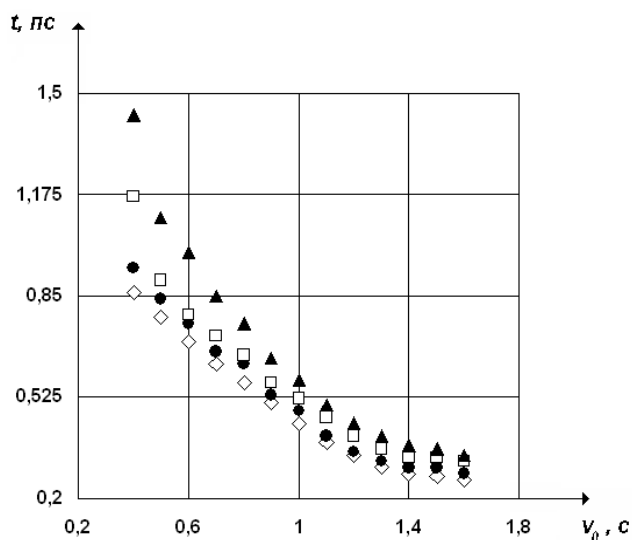


Рис. 5. Зависимость времени аннигиляции вакансий и краудионов от задаваемой скорости комплексов (c – скорость распространения звуковых волн в данном материале) при начальной температуре расчетного блока равной 0 (\diamond), 100 (\bullet), 200 (\square) и 300 (\blacktriangleright) К.

4. Заключение

Проведенное исследование показало, что существует два механизма торможения краудионных комплексов. При скоростях ниже скорости звука в рассматриваемом материале торможение краудионов определяется взаимодействием с фоновым газом. В случае, когда скорость комплексов превышает скорость звука, диссипация энергии происходит за счет соударений атомов при движении краудионов в плотноупакованном ряду. Возможно, подобные высокоскоростные, не зависящие от температуры, процессы могут иметь место при мартенситных фазовых превращениях.

Литература

1. V.L. Indenbom. Pisma v JETP. **12**, 526 (1970). (in Russian)
2. J.I. Dranova, A.M. Diachenko, I.M. Michailovsky. Pisma v JETP. **13**, 40 (1971). (in Russian)
3. Y.I. Golovin, A.I. Tyourin. Pisma v JETP. **60** (10), 722 (1994). (in Russian)
4. Y.I. Golovin, A.I. Tyourin. Physics of the Solid State, **42**, 1865 (2000).
5. N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, G.M. Poletaev, O.V. Pojidaeva, O.A. Tereshenko, R.Y. Rakitin, V.Y. Krasnov, V.A. Popov. Izvestiya vuzov. Fizika. **9**, 421 (2007). (in Russian)
6. M.D. Starostenkov, N.N. Medvedev, O.V. Pojidaeva, R.Y. Rakitin. Journal funktsionalnykh materialov. **1**(12), 468 (2007). (in Russian)
7. A.V. Markidonov, T.A. Tihonova, B.D. Nurkenova, G.M. Poletaev, M.D. Starostenkov. Izvestiya AltGU. Fizika. **1/2**(65), 175 (2010). (in Russian)
8. A.M. Kosevich, A.S. Kovalev. Vvedenie v nelineinuyu fizicheskuyu mekhaniku. Kiev, (1989) 304 p. (in Russian)
9. O.M. Braun, Y.S. Kivshar. The Frenkel-Kontorova

model. Springer, (2004) 536 p.

10. V.D. Nacik, E.I. Nazarenko. Fizika nizkikh temperatur, **26**(3), 283 (2000) (in Russian)
11. G.M. Poletaev. Autoreferat of the Doktor's Dissertation. Barnaul, (2008) 40 p. (in Russian)
12. A.I. Caregorodcev, N.V. Gorlov, B.F. Demianov, M.D. Starostenkov. FMM. **58**(2), 336 (1984) (in Russian)
13. G.M. Poletaev. MD3. The state certificate №2008610486 from 25.01.2008. (in Russian)
14. J.O. Rawlings, S.G. Pantula, D.A. Dickey. Applied Regression Analysis. Springer, (2001) 671 p.
15. D.M. Bates, D.G. Watts. Nonlinear regression analysis and its applications. Wiley: John Wiley & Sons, Inc. (1988) 365 p.
16. G.C. Chow. Econometrica. **28**(3), 591, (1960)
17. R.I. Garber, A.I. Fedorenko. UFN, **83**(3), 385 (1964) (in Russian)
18. V.I. Alshic, V.L. Indenbom. UFN, **115**(1), 3, (1975) (in Russian)
19. M.A. Shtremel. Prochnost splavov. MISIS, (1999) 384 p. (in Russian)