

Взаимодействие краудиона с границей биметалла Ni-Al в 2D модели

Старостенков М.Д.¹, Захаров П.В.^{1,2,†}, Медведев Н.Н.²

[†]zakharovpvl@rambler.ru

¹Алтайский государственный технический университет, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул

²Алтайская государственная академия образования, ул. Короленко, 53, 659333, Бийск

Interaction of crowdion with the Ni-Al bimetallic boundary in frame of the 2D model

M.D. Starostenkov¹, P.V. Zakharov^{1,2}, N.N. Medvedev²

¹Altai State Technical University, Lenin st. 46, 656038, Barnaul

²Altai State Academy of Education, Korolenko st., 659333, Biysk

Методом молекулярной динамики исследуется взаимодействие краудиона с границей биметалла. Установлено, что при столкновении краудиона с дислокацией несоответствия на границе биметалла порождается продольная волна атомных смещений, которая может приводить к направленному дрейфу вакансий в сторону границы биметалла.

Molecular dynamics method is used to study the interaction of crowdion with the bimetallic boundary. It is established that the collision of crowdion with a misfit dislocation at the bimetallic boundary generates a longitudinal wave of atomic displacements, which can lead to directional drift of vacancies toward the bimetallic boundary.

Ключевые слова: молекулярная динамика, краудион, биметалл, вакансии.

Keywords: molecular dynamics, crowdion, bimetal, vacancy.

1. Введение

Краудион – одномерное сгущение в расположении атомов или ионов в кристалле, образуемое межузельным атомом, когда в направлении вдоль плотной упаковки на дистанции в несколько межатомных расстояний располагается один лишний собственный атом или ион. Динамика краудиона отличается от характерной для точечных дефектов: его подвижность очень велика вдоль направления плотной упаковки (даже при низких температурах, когда проявляются квантовые эффекты [4]) и равна нулю для всех остальных направлений [1].

Изучение краудионов, как и других дефектов в кристаллах, посредством модельных экспериментов активно началось с появлением первых ЭВМ [2,3]. В настоящее время эти исследования по-прежнему актуальны и приносят определенные плоды. Перечислим из последних результатов, на наш взгляд, наиболее интересные. Так, в относительно недавних работах было показано, что краудионы играют очень важную роль в термически пусковом перемещении межузельных атомов [5,6]. Кроме

того, краудионы содействуют массопереносу при пластической деформации [7-9]. Было также обнаружено, что диффузия на некоторых напряженных поверхностях может быть промежуточным механизмом массопереноса посредством формирования и движения поверхностного краудиона [10]. В недавнем прошлом кооперативные атомные движения привлекли большое внимание исследователей, и роль краудионов в таких движениях была показана в [11].

Настоящая работа является продолжением исследований начатых в [12], где оценивается устойчивость динамики краудиона в 2D и 3D модельных решетках Ni. В 2D модели было установлено, что окно скоростей устойчивого движения краудиона составляет диапазон: 12000 – 14000 м/с, при таких скоростях движения краудион может перемещаться на десятки и даже сотни межатомных расстояний. Под скоростью движения краудиона понимается кооперативный сдвиг на одно межатомное расстояние всей цепочки атомов, содержащих краудион в единицу времени.

Целью данной работы является выявление результатов взаимодействия динамических краудионов с границей биметалла Ni-Al в двумерной модели кристаллической решетки, построенной методом молекулярной динамики.

Мы рассматриваем движение краудиона в устойчивом диапазоне скоростей в соответствии с работой [12]. На наш взгляд, модель соответствует случаю движения краудиона, рожденного, например, на поверхности металла или в непосредственной близости от нее, при воздействии на нее излучения.

2. Описание модели и методика эксперимента

Кристаллическая решетка Ni-Al моделировалась методом молекулярной динамики, атомы которой взаимодействовали посредством парных потенциалов Морзе.

Способ создания начальной конфигурации расчетной ячейки, как предложено в [13], включал три стадии: построение, первичная релаксация и охлаждение.

Граница в биметалле Ni-Al проходила через середину ячейки содержащей 5000 частиц (50×100 частиц). Ячейка представляла собой плоскость {111}. Выбор данной плоскости для исследования обусловлен тем, что диффузионные процессы, как правило, развиваются в плотноупакованных направлениях, которым соответствуют плоскости {111} в обычном ГЦК кристалле [14]. Граничные условия для расчетной ячейки задавались следующим образом: по оси x – периодические, по оси y – свободные (рис. 1). Начальная температура ячеек задавалась равной нулю Кельвин.

Искусственно созданная граница раздела металлов, подвергалась процедуре релаксации, в течение которой граничные атомы занимали равновесное положение. В результате релаксации наблюдалось повышение температуры ячейки до нескольких десятков Кельвин. Время релаксации ячейки составило 100 пс, на этап охлаждения было отведено 10 пс. Таких временных рамок эксперимента достаточно для того, чтобы ячейка успела избавиться от лишнего свободного объема, который возникал на границе металлов при создании начальной структуры. В итоге формировалась граница с характерными дислокациями несоответствия из-за различия постоянных решеток (рис. 1).

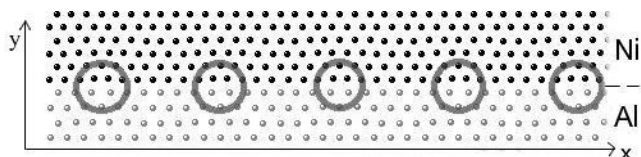


Рис. 1. Граница биметалла Ni-Al, с выделенными дислокациями несоответствия.

3. Результаты и обсуждения

Краудион возбуждали на расстоянии от 20 до 50 межатомных расстояний вдоль плотно упакованного ряда от границы биметалла, посредством придания атому энергии достаточной для преодоления барьера Пайерлса. Та-

ким образом, чтобы скорость краудиона была в пределах 12000 – 14000 м/с.

При скоростях до 12300 м/с краудион не может преодолеть границу. Это вызвано наличием вершинных дислокаций несоответствия, а так же повышенным энергетическим барьером на границе биметалла. При приближении к границе скорость краудиона уменьшается и под воздействием поля ближайшей дислокации несоответствия происходит движение межузельного атома краудиона в сторону ДН. Это приводит к движению дислокации вглубь Al, т.е. происходит переползание вершинной дислокации несоответствия. Таким образом, кинетическая энергия краудиона переходит в структурные трансформации границы биметалла.

На рис. 2, а и б показаны результаты динамически-структурных трансформаций на границе биметалла Ni-Al. Рис. 2, а иллюстрирует атомные смещения при движении краудиона, а так же выделены дислокации несоответствия. На рис. 2, б показаны вершинные дислокации несоответствия, в центре находится дислокация, которая при взаимодействии с краудионом переместилась на одно межатомное расстояние вглубь Al.

Однако при скоростях краудиона от 12300 до 14000 м/с он способен преодолеть границу биметалла и продолжить движение во второй компоненте – Al (рис. 3). Но при этом стоит заметить, что это возможно при прохождении краудиона не менее чем в 2 межатомных расстояниях от вершины дислокации несоответствия. В противном случае, это приводит к формированию продольной волны и к консервативному движению дислокации, как в выше описанном случае.

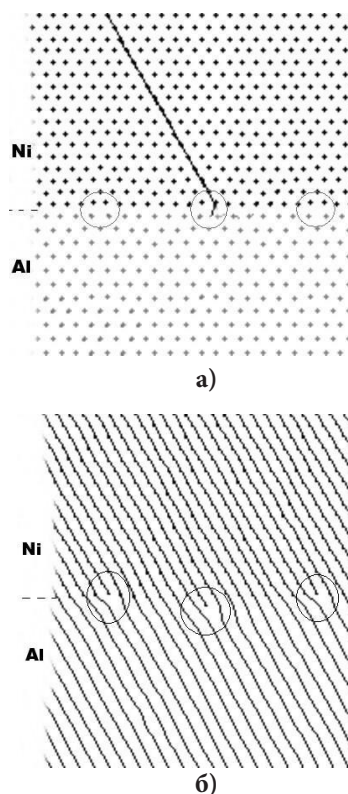


Рис. 2. Граница биметалла Ni-Al после взаимодействия динамического краудиона с вершинной дислокацией несоответствия.

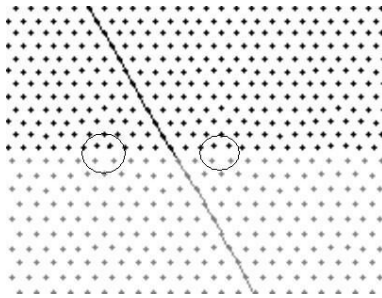


Рис. 3. Траектория движения краудиона через границу биметалла Ni-Al, обладающего скоростью 13500 м/с, кругами выделены две ближайшие дислокации.

Например, при движении краудиона по экстраплоскости вершинной дислокации несоответствия со скоростью 13500 м/с формируется продольная волна (рис. 4) и происходит переползание дислокации.

Скорость распространения продольной волны имеет смысл сравнивать с какой-нибудь характерной величиной, например, со скоростью звука в рассматриваемой модельной решетке. Скорость звука можно определить следующим образом. Произвольному атому или группе атомов, находящихся в одном ряду кристаллической решетки, имеющей нулевую температуру, сообщалось незначительное, порядка $0,01 \text{ \AA}$ отклонение от положения равновесия или малая скорость, порядка 10^{-2} \AA/пс . Отслеживая распространение возмущения с течением времени можно оценить его скорость движения.

Измеренная таким образом скорость звука в рассматриваемой модельной решетке составила приблизительно 5350 м/с. Напомним, что реальная скорость звука в алюминии – 5200 м/с.

Скорость распространения порожденной волны составляет порядка 9000 м/с, это превосходит скорость звука в Al в 1,68 раза.

Подобные волны могут вызывать дрейф точечных дефектов. Оказалось, что при взаимодействии с одиночной вакансией волна, порожденная столкновением краудиона с ДН, вызывает ее направленное смещение на одно межатомное расстояние вдоль плотноупакованного ряда в сторону границы биметаллов. Однако, не смотря на то, что волна распространяется на сотни ангстрем от грани-

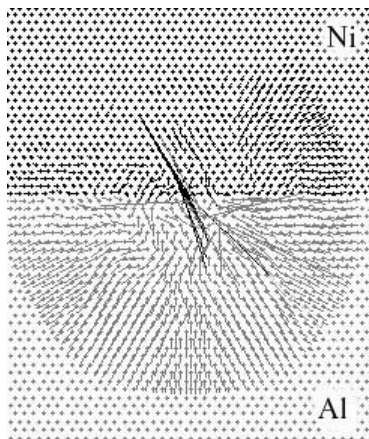


Рис. 4. Продольная волна, сформировавшаяся в результате столкновения краудиона и вершинной дислокации несоответствия, на границе биметалла Ni-Al, смещения атомов увеличены в 10 раз, 0,4 пс. после начала эксперимента.

цы биметалла, расстояние, на котором были зафиксированы подвижки дислокаций, не превышало 10 межатомных, что составляет порядка 27 \AA . По всей видимости, это вызвано наложением двух факторов, во-первых, действием продольной волны, а во-вторых, полем дислокаций несоответствия на границе биметалла. Наличие одного фактора не достаточно для миграции вакансий.

4. Заключение

Таким образом, методом молекулярной динамики было показано, что при скоростях до 12300 м/с устойчивого движения краудиона, он не способен преодолеть границу биметалла Ni-Al. При этом происходят динамически структурные превращения на границе биметалла: столкновение краудиона с дислокацией несоответствия приводит к переползанию дислокации на одно межатомное расстояние вглубь Al. При скоростях 12300 – 14000 м/с возможен проход краудиона через границу биметалла. В случае столкновения с дислокацией несоответствия происходит формирование продольной волны и так же наблюдается диссипативное движение дислокации несоответствия. Подобная волна может приводить к направленному дрейфу вакансий.

Литература

1. B.A. Kalin. Physical Materials Science, Moscow MIFI (2008). ISBN 978-5-7262-0821-3. (in Russian).
2. L. Tewordt. Phys. Rev. **109**, 61 (1958).
3. K.H. Bennemann, Phys. Rev. **124**, 669 (1961).
4. D.I. Pushkarov. Journal of Experimental and Theoretical Physics. **64**, 634 (1973) (in Russian).
5. N.H. March, D.I. Pushkarov, J. Phys. Chem. Solids. **57**, 139 (1996).
6. P.M. Derlet, D. Nguyen-Manh, S.L. Dudarev, Phys. Rev. B **76**, 054107 (2007) .
7. Z.K. Saralidze, M.V. Galustashvili, D.G. Driaev, Phys. Solid State **48**, 1298 (2006).
8. Yu.I. Golovin, A.I. Tyurin, Phys. Solid State **42**, 1865 (2000).
9. Yu.I. Golovin, Phys. Solid State **50**, 2205 (2008).
10. W. Xiao, P.A. Greaney, D.C. Chrzan, Phys. Rev. Lett. **90**, 156102 (2003) .
11. G.M.Poletaev, M.D. Starostenkov, Phys. Solid State **51**, 727 (2009) (in Russian).
12. A.M. Iskandarov, N.N. Medvedev, P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev. Computational Materials Science **47**, 429 (2009).
13. G.M.Poletaev. Study interdiffusion processes in two-dimensional system Ni-Al: Ph.D. dissertation. Ph-math. of Sciences. (2002) (in Russian).
14. M.D. Starostenkov, A.V. Markidonov, T.A. Tihonova, N.N Medvedev. Izvestiya Vuzov. Chernaya Metalurgiya **6**, 57 (2009) (in Russian).