

Рост малых вакансионных скоплений, инициированных послекаскадными ударными волнами

Маркидонов А.В.^{1,†}, Старостенков М.Д.^{2,‡}, Захаров П.В.³

[†]markidonov_artem@mail.ru; [‡]genphys@mail.ru

¹Филиал Кузбасского государственного университета им. Т.Ф. Горбачева, ул. Орджоникидзе 7, 654000 г. Новокузнецк

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

³Алтайская государственная академия образования им. В.М. Шукшина, ул. Короленко 53, 659333 г. Бийск

The growth of small vacancy clusters initiated by the post-cascade shock waves

A.V. Markidonov¹, M.D. Starostenkov², P.V. Zakharov³

¹Branch of the Kuzbass State Technical University, Ordzhonikidze St. 7, 654000 Novokuznetsk

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

³Altai State Academy of Education, Korolenko St. 53, 659333 Biysk

Предложен механизм роста малых вакансионных скоплений, согласно которому одиночные вакансии могут быть присоединены к скоплению за счет перемещения ударными волнами, образующимися при радиационном облучении материалов. Исследование проведено при помощи метода молекулярной динамики.

The mechanism of growth of small vacancy clusters, according to which single vacancies can be moved to attach to a vacancy cluster by the shock waves formed during the radiation exposure of the material, is proposed. The study was conducted using the molecular dynamics method.

Ключевые слова: молекулярная динамика, ударная волна, вакансионное скопление.

Keywords: molecular dynamics, shock wave, vacancy cluster.

1. Введение

Известно, что при облучении металлов высокоэнергетическими частицами образуется высокая концентрация точечных дефектов. Часть этих дефектов аннигилирует, другая – стекает на естественные стоки, а третья часть дефектов образует различные комплексы. Дальнейший приток точечных дефектов к таким скоплениям приводит к изменению их размеров или структурной перестройке.

Считается, что дислокации и дислокационные петли сильнее взаимодействуют с межузельными атомами из-за их большей подвижности в кристаллической решетке (явление преференса). Несмотря на то, что это различие составляет всего 1–2 % [1], в облученном материале возникает поток смещенных атомов к дислокациям. Из-за возникшего избытка, вакансии образуют различные скопления, в частности поры. Гомогенный рост поры начинается с образования малых вакансионных комплексов, например, тетравакансий. Дальнейшее разрастание

поры может приводить к распуханию материала, что в некоторых случаях является крайне не желательным.

Образование каскада атомных смещений при радиационном облучении материала может вызывать также образование ударных волн, получивших название послекаскадных [2]. Их возникновение обусловлено различием между временем термализации атомных колебаний в некоторой конечной области и временем отвода из нее тепла. В результате резкого расширения сильно разогретой области формируется почти сферическая ударная волна.

Цель настоящей работы заключается в исследовании влияния ударных послекаскадных волн на процессы зарождения и роста радиационной поры.

2. Описание модели

В связи с тем, что исследуемые процессы отличаются высокой скоростью протекания и малые размеры, наиболее ра-

циональным видится использование методов компьютерного моделирования.

Эксперимент проводился на расчетном блоке, имитирующем трехмерный кристалл чистого алюминия, состоящем из 30000 атомов. Взаимодействие между атомами описывалось с помощью парного потенциала Морзе. Компьютерный эксперимент выполнялся по методу молекулярной динамики с использованием программы [3].

При конструировании расчетного блока, в зависимости от условия задачи, создавалась определенная конфигурация вакансий. При старте эксперимента группе атомов присваивалась одинаковая по величине начальная скорость вдоль плотноупакованного направления типа $\langle 110 \rangle$. Таким образом, в кристалле создавалась волна. Необходимо оговорить, что благодаря фокусировке атомных столкновений послекаскадные ударные волны трансформируются во фрагменты плоских волн [2], поэтому подобное приближение оправдано. В дальнейшем включалась процедура релаксации структуры, и через определенные интервалы времени фиксировалось ее изменение.

Основным визуализатором динамики структуры в работе являлся визуализатор атомных смещений. В случае выбранного единичного масштаба, смещения изображались в виде отрезков соединяющих начальное и конечное положение атомов.

3. Результаты моделирования

Для начала рассмотрим различные малые вакансионные скопления. В работе [4] показано, что наиболее выгодными конфигурациями вакансионных комплексов в

ГЦК-металлах являются тетраэдры дефектов упаковки. Грани таких тетраэдров ориентированы вдоль плоскостей типа $\{111\}$ и являются дефектами упаковки, а ребра ориентированы вдоль направлений $\langle 110 \rangle$ и представляют собой вершинные дислокации. Также показано, что малые вакансионные комплексы, можно представить либо в виде элементарных тетраэдров дефектов упаковки, либо в виде нескольких тетраэдров.

Исследование, проведенное в настоящей работе, показало, что прохождение ударных волн через различные вакансионные скопления вызывает их трансформации, в результате которых образуются комплексы, представляющие собой несколько тетраэдров дефекта упаковки. Так, например, рассмотрим линейное скопление четырех вакансий, представляющее собой цепочку вдоль плотноупакованного кристаллографического направления типа $\langle 110 \rangle$. При нагреве кристалла до 200 К данное скопление трансформируется в сдвоенный тетраэдр. Ударная волна, проходящая через линейное скопление вакансий, также вызывает его трансформацию в сдвоенный тетраэдр. Необходимо оговорить, что в модели кристалла, используемой для экспериментов, полная энергия остается постоянной. Поэтому, при создании в расчетном блоке волны, температура кристалла повышается, и в дальнейшем остается постоянной. Тем не менее данной температуры было недостаточно для активации перестройки вакансионного скопления. Таким образом, ударная волна может вызывать трансформацию вакансионных комплексов даже при температурах недостаточных для начала диффузионных процессов. Перестройка вызывается тем, что во фронте ударной волны образуется область повышенного давления, куда и устремляются вакансии

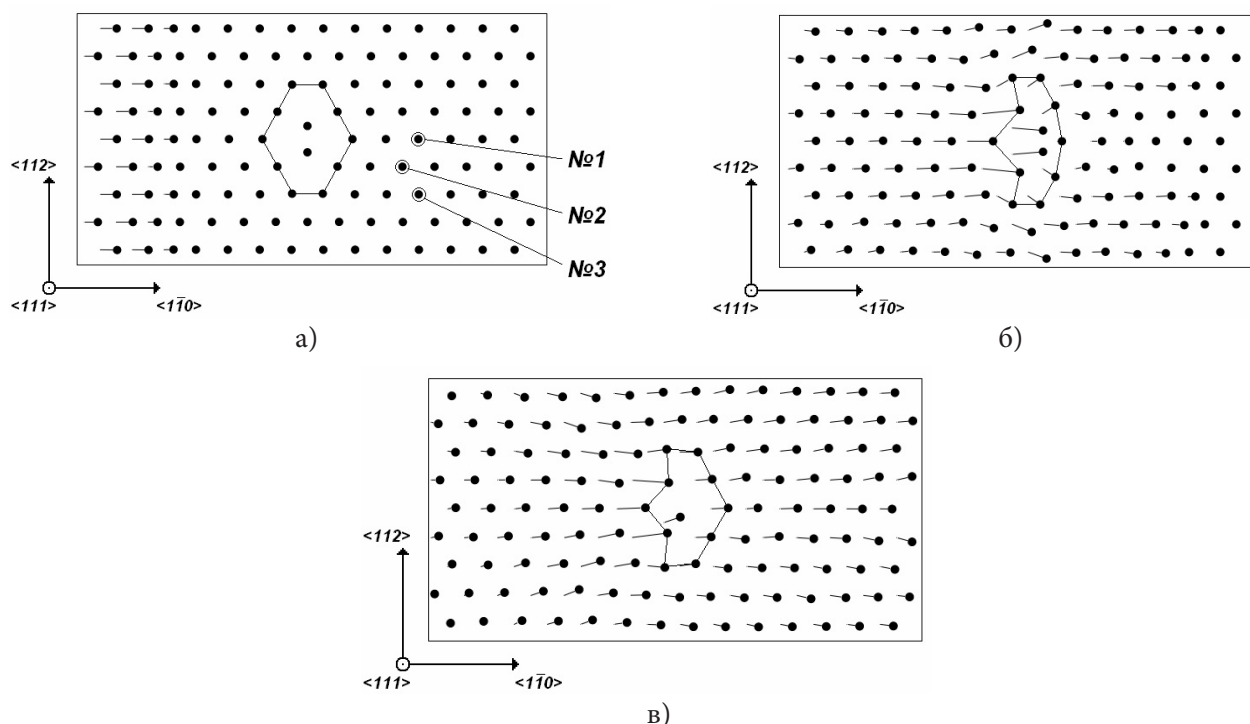


Рис. 1. Фрагмент атомной плоскости расчетного блока, содержащей вакансионный комплекс, через 0.05 (а), 0.30 (б) и 0.50 пс (в) с начала эксперимента. Комплекс выделен линиями. Скорость волны равна 8000 м/с. Нумерация произведена для контрольных атомов, координата и скорость которых фиксируется в течение эксперимента.

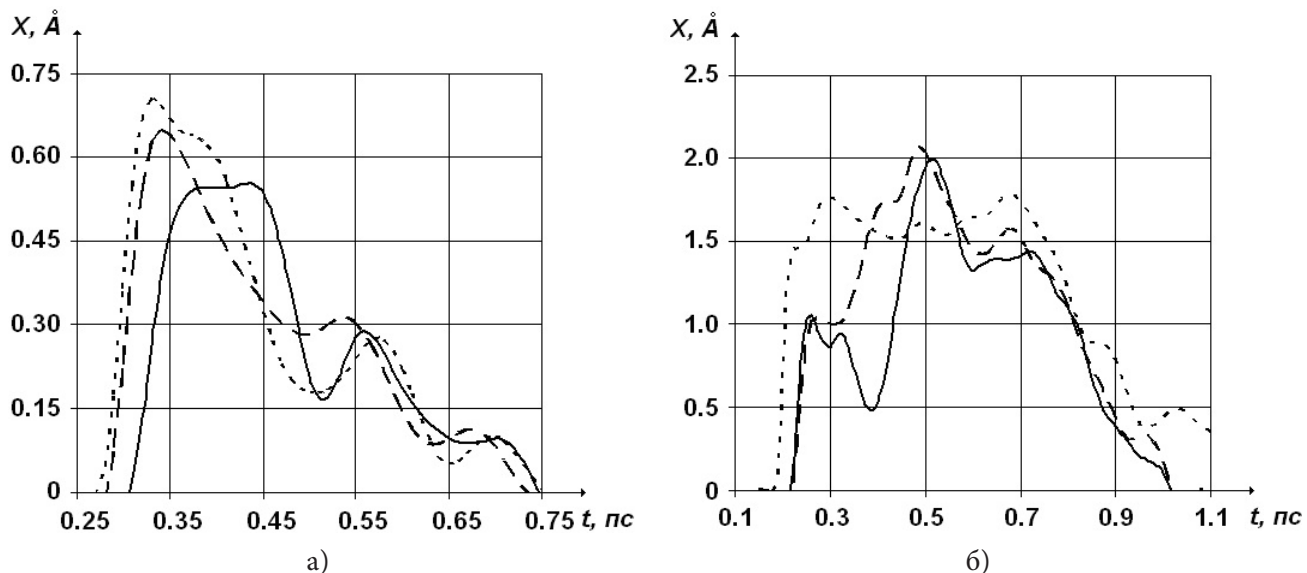


Рис. 2. Зависимость изменения координаты X атома от времени эксперимента при начальной скорости волны 4000 (а) и 8000 м/с (б). Сплошная линия – контрольный атом №1, пунктир – №2, точечная линия – №3.

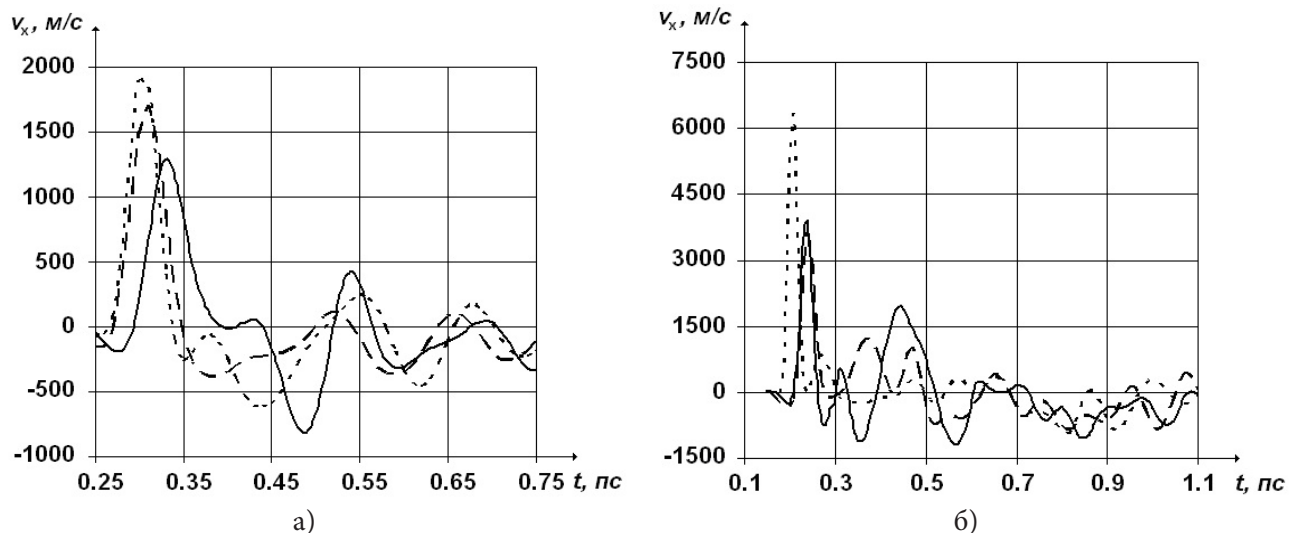


Рис. 3. Зависимость проекции вектора скорости на ось OX от времени эксперимента при начальной скорости волны 4000 (а) и 8000 м/с (б). Сплошная линия – контрольный атом №1, пунктир – №2, точечная линия – №3.

при приближении фронта к скоплению. Поэтому трансформации будут вызывать не любые волны, а только ударные.

Образовавшийся вакансионный комплекс, представляющий собой сдвоенный тетраэдр дефектов упаковки, остается стабильным при прохождении через него ударной волны. Так на рис. 1 представлен следующий эксперимент. Ударная волна распространяется в кристалле и встречает на своем пути вакансионный комплекс. При пересечении фронтом волны комплекса, наблюдается его деформирование, но через некоторое время он принимает первоначальную форму. Как видно из рис. 1,б, атомы, расположенные за комплексом вакансий, не испытывают смещений при прохождении волны, но тем не менее, в дальнейшем они увлекаются смещающимися атомами (см. рис. 1,в).

Очевидно, что при встрече волны с вакансией данный точечный дефект сместится на одно межатомное

расстояние против направления движения волны. Для того чтобы вакансия заняла новое положение, величина смещения соседнего атома должна превысить некоторое значение, которое можно определить как половину межатомного расстояния. Для ГЦК решетки это расстояние будет равно $\sqrt{2}a/4$, где a – параметр решетки. Так как в настоящей работе компьютерный эксперимент проводился с кристаллом алюминия, то тогда искомое расстояние будет равно 1.49 Å. В случае если после преодоления вакансионного комплекса волной, величина смещений атомов будет достаточной для перемещения вакансии, то можно говорить о возможности присоединения одиночных вакансий к комплексу за счет увлечения их ударными волнами.

Рассмотрим следующий эксперимент. В кристалле, содержащем комплекс из четырех вакансий, возбуждается продольная волна, распространяющаяся вдоль направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$. После этого фиксируется изменение

координат и скорости контрольных атомов, расположенных за комплексом вакансий, в течение эксперимента (см. рис. 1,а).

В связи с тем, что наибольшее изменение скорости атомов наблюдается в направлении движения волны, то выберем некоторую числовую ось OX , совпадающую с направлением $\langle 1\bar{1}0 \rangle$. Рассмотрим изменение координаты X контрольных атомов, а также проекцию вектора скорости на эту ось при различной скорости проходящей через комплекс волны (см. рис. 2 и 3).

Из рисунка 2 видно, что в случае если скорость упругой волны не превышает скорость звука (скорость звуковых волн в алюминии равна 5105 м/с), то величины смещений атомов недостаточно для миграции вакансий. Сравнивая рисунки 2,а и 3,а, можно сделать вывод, что в данном случае наибольшие атомные смещения возникают в момент прохождения фронта волны через соответствующие атомы, при этом наименьшие смещения и скорости наблюдаются у атомов расположенных непосредственно за вакансионным комплексом. Последующие локальные максимумы на графиках соответствуют восстановлению кристаллической структуры после прохождения волны.

Совсем иная картина наблюдается в случае, если скорость волны превышает скорость звука. Несмотря на то, что в работе представлены результаты эксперимента, в котором скорость волны задавалась равной 8000 м/с, схожие результаты были получены и для других высоких значений скорости. Первый локальный максимум на графике рисунка 2,б соответствует моменту прохождения волны через контрольный атом. Как видно из рисунка 3,б скорость атома в данный момент максимальна. Смещение вакансии в этом случае может быть осуществлено, только если она находится в атомном ряду, в котором расположен контрольный атом №3 (см. рис. 1). Необходимо отметить, что графики на рисунках 2 и 3, построенные для этого атома, практически полностью совпадают с графиками, построенными для того же атома в идеальном кристалле.

После прохождения волны, контрольные атомы №1 и №2 смещены гораздо меньше по сравнению с атомом №3. Как видно из рисунка 1,б эстафетные атомные смещения не преодолевают вакансионный комплекс. Но через некоторое время (см. рис. 1,в) данные атомы увлекаются в разреженную область, возникшую в результате прохождения волны, причем величина их смещения может быть даже больше смещения соседних атомов (см. рис. 2,б). Величина смещений атомов в данный момент достаточна для создания дрейфа вакансий.

Атомы, за которыми велось наблюдение в предыдущем эксперименте, располагались в непосредственной близости от вакансионного комплекса. Интерес вызывает сравнение значений исследуемых характеристик с аналогичными характеристиками атомов, расположенных на большем расстоянии, при условии, что скорость волны превышает скорость звука.

Исследование показало, что чем дальше атомы расположены от вакансионного комплекса, чем меньше их смещение, вызываемое прохождением фронта ударной волны.

В работе были рассмотрены и другие вакансионные комплексы, состоящие, например, из девяти вакансий. Результаты оказались схожи.

4. Заключение

Таким образом, после проведенного исследования можно предложить следующий механизм роста малых вакансионных скоплений. В результате радиационного облучения образуются ударные волны, которые, распространяясь в кристалле, могут вызывать дрейф вакансий. Спонтанно образовавшиеся вакансионные скопления после прохождения ударной волны трансформируются в комплекс, представляющий собой один или несколько тетраэдров дефектов упаковки. Данные образования являются наиболее устойчивыми, и последующие волны не вызывают их трансформаций. Малые вакансионные скопления не представляют собой непреодолимое препятствие для подобных волн. Поэтому одиночные вакансии могут быть притянуты к таким скоплениям в результате прохождения нескольких ударных волн даже при температурах, недостаточных для начала диффузионных процессов. Возможно, именно такой механизм гомогенного образования вакансионных пор реализуется в условиях интенсивного радиационного облучения материалов.

Литература

1. B.A. Kalin. Fizicheskoe materialovedenie. Vol. 4. Ed. by B.A. Kalin. Moscow: MIFI (2008) 696 p. (in Russian).
2. V.V. Ovchinnikov. Physics - Uspekhi **51**(9), 955 (2008).
3. G.M. Poletaev. MD3. The state certificate №2008610486 from 25.01.2008. (in Russian).
4. G.M. Poletaev. Author's Abstract of the Doktor Thesis. Barnaul (2008) 40 p. (in Russian).