

*A.B. Маркидонов, Т.А. Тихонова, Б.Д. Нуркенова,
Г.М. Поletaев, М.Д. Старостенков*

Воздействие продольных волн на комплексы точечных дефектов в ГЦК кристалле

*A.V. Markidonov, T.A. Tikhonova, B.D. Nurkenova,
G.M. Poletaev, M.D. Starostenkov*

The Influence of Longitudinal Waves on Complexes of Point Defects in FCC Crystal

Методом молекулярной динамики исследуется влияние кооперативных атомных смещений, представляющих собой продольную волну, образующуюся при низкоэнергетических воздействиях, на процесс структурной релаксации ГЦК кристалла, содержащего точечные дефекты.

Ключевые слова: молекулярная динамика, точечные дефекты, продольная волна, структурная релаксация, миграция дефекта.

Введение. Известно, что при различных высокоэнергетических воздействиях, таких как, например, радиационное облучение или ударная деформация, образуются пары Френкеля. Условием образования пары является сообщение атому энергии, достаточной для того, чтобы не только сместиться из узла кристаллической решетки, но и превысить некоторый радиус спонтанной рекомбинации образующейся вакансии и межузельного атома [1]. При более значительных энергиях образуется целая цепочка атомных столкновений, и тогда процесс представляет собой уже каскад. При низких же значениях вся переданная энергия рассеивается в тепло. Тем не менее облучение материала даже ионами низких энергий приводит к ряду физических явлений [2]. Сообщение атому кристаллической решетки незначительного импульса приводит к коллективным атомным смещениям, представляющим собой волну, распространяющуюся радиально от возмущенного атома [3]. Волны, распространяющиеся со звуковыми скоростями, рассмотрены в работе [4]. Кроме этого, подобные волны атомных смещений возникают в процессе релаксации кристаллических структур, содержащих точечные дефекты [5, 6]. В [7, 8] показано, что они являются инициаторами высокоскоростных кооперативных атомных смещений, приводящих к аннигиляции точечных дефектов. В [9] показано взаимодействие волн, образующихся при аннигиляции пар Френкеля, с комплексами точечных дефектов.

Цель данной работы – исследование влияния описанных выше волн атомных смещений, обра-

The influence of cooperative atomic displacements representing a longitudinal wave formed at low-power influences on process of structural relaxation of FCC crystal with point defects was studied by the method of molecular dynamics.

Key words: molecular dynamics, point defects, longitudinal wave, structural relaxation, defect migration.

зующихся при низкоэнергетических воздействиях, на процесс релаксации кристаллической структуры, содержащей группы точечных дефектов.

Описание эксперимента. Эксперимент проводился на расчетном блоке, имитирующем трехмерный кристалл чистого алюминия. Взаимодействие между атомами описывалось с помощью парного потенциала Морза:

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

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.

Значения параметров потенциала брались из [10]. Применение простого полуэмпирического потенциала является оправданным, так как упругие нелинейные характеристики взаимодействия определяются объемным модулем упругости, по которому достаточно точно подгонялись параметры потенциала. Взаимодействие между атомами ограничивалось пятью первыми координационными сферами. Компьютерный эксперимент выполнялся по методу молекулярной динамики.

В центр расчетного блока внедрялись точечные дефекты. Продольная волна создавалась путем сообщения трем центральным атомам на границе расчетного блока некоторой скорости вдоль направления $\langle 111 \rangle$. После конструирования расчетного блока включалась процедура релаксации путем разогрева кристалла вблизи 0 К. Затем при помощи визуализа-

тора распределения потенциальной энергии рассматривались образующиеся после релаксации конфигурации точечных дефектов. С использованием данного визуализатора рассчитывалась потенциальная энергия для каждого из атомов, и он окрашивался в определенный цвет. Так, более темный цвет атомов соответствует меньшему значению энергии, а светлый – большему. Для наглядности атомы с определенными значениями энергии не показывались. Кроме этого, в работе также использовался визуализатор атомных смещений, представляющий собой линии, соединяющие начальное и конечное положение атомов.

Результаты эксперимента и обсуждение. При конструировании расчетного блока дефекты вводились в одну плоскость $\{111\}$ так, как показано на рисунке 1.

Распределение энергии атомов в расчетном блоке после структурной релаксации вблизи комплекса

из трех вакансий изображено на рисунке 2(а). Конфигурация атомов в данном случае представляет собой практически идеальный октаэдр, вершины которого ориентированы вдоль направлений $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$. При уменьшении диапазона показываемых значений энергий, видно, что данный комплекс представляет собой объемную тривакансию (рис. 2б).

На рисунке 3(а) показано распределение энергии атомов в расчетном блоке после структурной релаксации вблизи комплекса из трех межузельных атомов. При внедрении дефектов в октаэдрическую пустоту в процессе релаксации межузельные атомы образуют объемный комплекс из трех краудионов, ориентированных вдоль направления типа $\langle 011 \rangle$ (рис. 3а). При внедрении межузельных атомов в энергетически менее выгодное положение – тетраэдрическую пустоту – в процессе релаксации они удаляются друг от друга (рис. 3б).

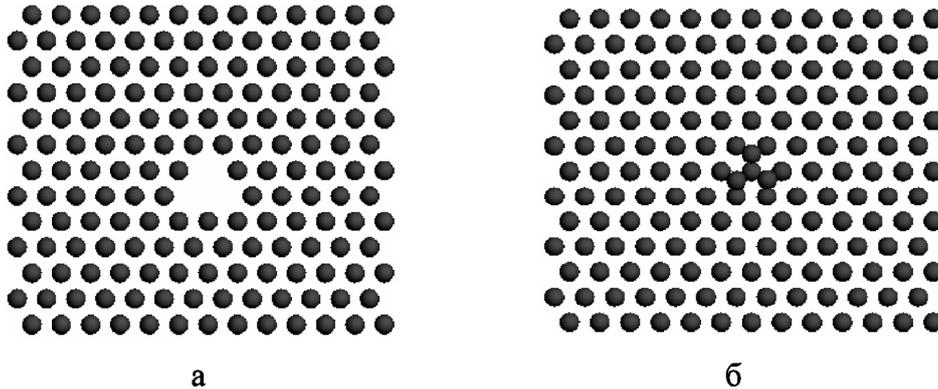


Рис. 1. Фрагменты расчетных блоков с комплексами из трех вакансий (а) и межузельных атомов (б) в начале эксперимента

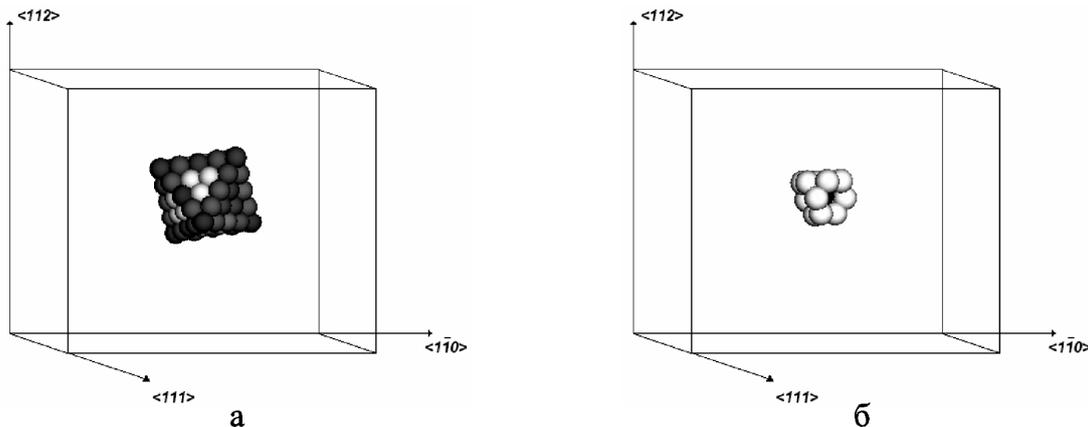


Рис. 2. Распределение энергии атомов в расчетном блоке (фрагмент), содержащем комплекс из трех вакансий. Не показаны атомы с энергией связи в интервалах $-3.84 \dots -3.28$ эВ (а) и $-3.39 \dots -3.12$ эВ (б) (энергия связи атома в идеальном кристалле -3.34 эВ)

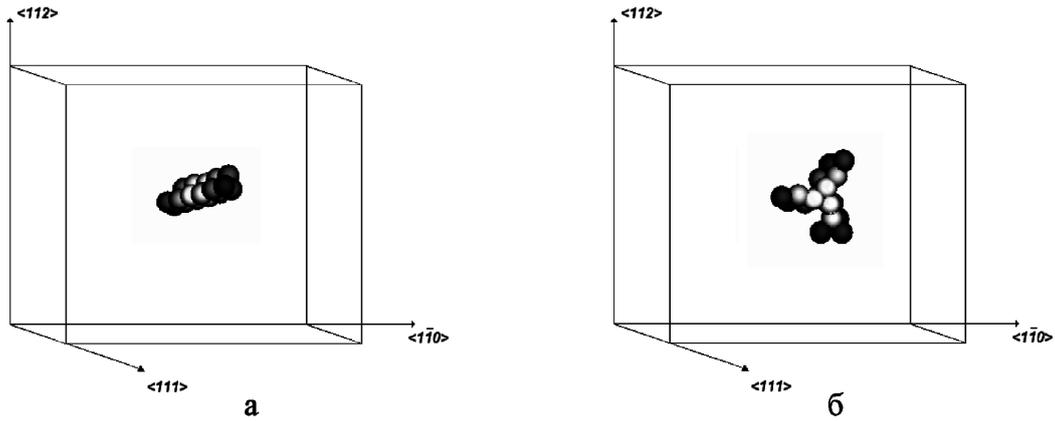


Рис. 3. Распределение энергии атомов в расчетном блоке (фрагмент), содержащем комплекс из трех межузельных атомов, внедренных в октаэдрическую (а) и тетраэдрическую (б) пустоты. Не показаны атомы с энергией связи в интервалах $-3.82 \dots -2.58$ эВ (а) и $-3.82 \dots -2.53$ эВ (б) (энергия связи атома в идеальном кристалле -3.34 эВ)

В работе были рассмотрены изменения в процессе релаксации, вносимые продольной волной, возбужденной в кристаллической структуре. Как говорилось выше, волна создавалась путем сообщения атомам начальной скорости в направлении $\langle 111 \rangle$. На рисунке 4 при помощи визуализатора атомных смещений представлена эволюция продольной волны.

Исследование показало, что фронт волны, проходящей через комплекс вакансий, не оказывает на них практически никакого влияния. Совсем иная картина наблюдается в эксперименте с межузельными атомами. Трём центральным атомам крайней плоскости расчетного блока в самом начале эксперимента задавалась начальная скорость, равная 10^4 м/с, по направлению к центру расчетного блока, т.е. по направлению к межузельным атомам. Прохождение фронта продольной волны через комплекс межузельных атомов приводило к тому, что в случае их первоначального расположения в октаэдрической пустоте

образовывался комплекс, представленный на рисунке 5(а), а при первоначальном внедрении их в тетраэдрическую пустоту возникал объемный краудиионный комплекс, ориентированный вдоль направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ (рис. 5б).

Эксперимент показал, что продольная волна начинает оказывать влияние на образующийся в процессе релаксации комплекс дефектов только в том случае, если ее скорость превышает скорость звука в кристалле. Если продольная волна создавалась в кристалле не в начале эксперимента, а после того как комплекс дефектов сформировался в процессе релаксации, то наблюдался эффект, заключающийся в том, что объемный краудиионный комплекс, представленный на рисунке 3(а), при прохождении через него волны, смещался по ходу ее распространения вдоль своей оси (направления типа $\langle 110 \rangle$). Величина смещения была невелика и не превышала одного межатомного расстояния, но очевидно, что несколько волн, следующих друг за другом, способны переместить данный комплекс на большие расстояния.

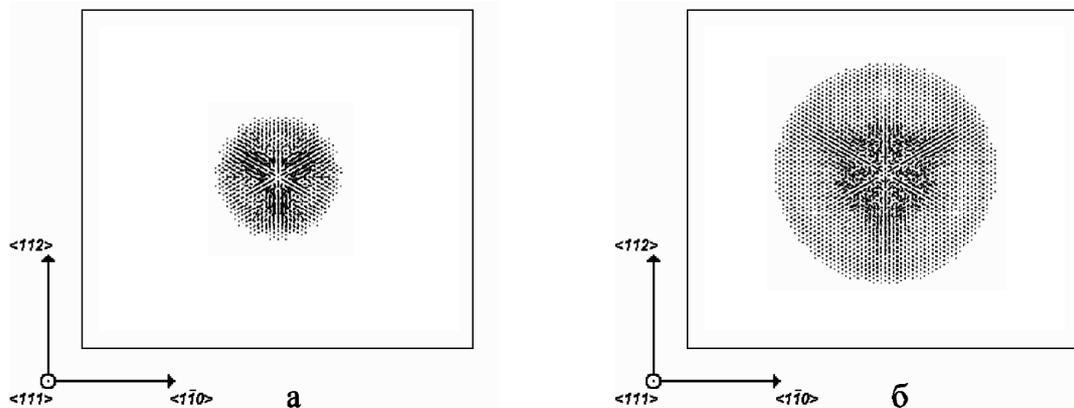


Рис. 4. Атомные смещения через 0.25 (а) и через 0.50 (б) пс эксперимента. Масштаб смещений увеличен в 10 раз. Атомы решетки не показаны

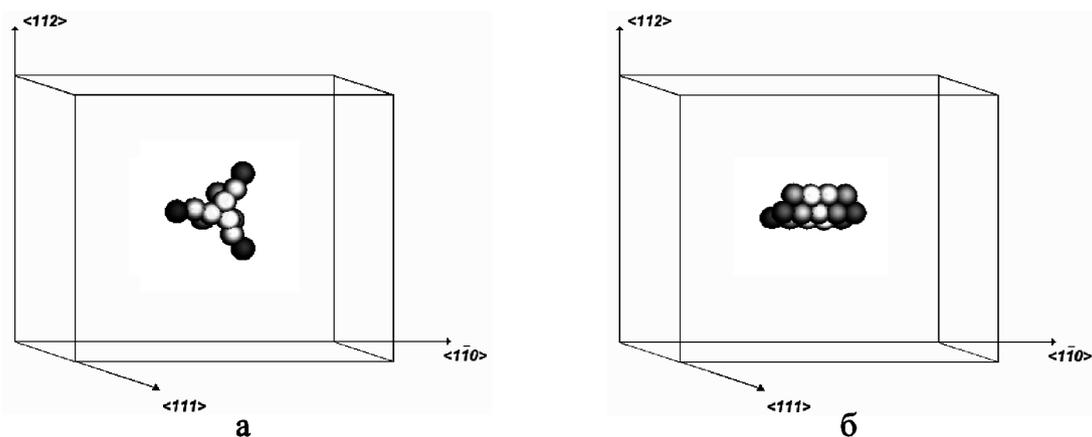


Рис. 5. Распределение энергии атомов в расчетном блоке (фрагмент), содержащем комплекс из трех межузельных атомов, внедренных в октаэдрическую (а) и тетраэдрическую (б) пустоты после прохождения продольной волны. Не показаны атомы с энергией связи в интервалах $-3.82\dots-2.59$ эВ (а) и $-3.82\dots-2.64$ эВ (б) (энергия связи атома в идеальном кристалле -3.34 эВ)

Заключение. Молекулярно-динамическое исследование показало, что даже при низкоэнергетическом воздействии на материал, когда не образуются точечные дефекты, возникающая при этом продольная волна способна оказывать влияние как

на процесс формирования комплекса межузельных атомов, так и на уже сформировавшийся комплекс. Продольная волна может провоцировать миграцию всего комплекса.

Библиографический список

1. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. I: Дефекты решетки: учебник для вузов. – М., 1999.
2. Белоус В.А., Лапшин В.И., Марченко И.Г., Неклюдов И.М. Радиационные технологии модификации поверхности. I. Ионная очистка и высокодозовая имплантация // Физическая инженерия поверхности. – 2003. – Т. 1, №1.
3. Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Мулюков Р.Р., Пожидаева О.В., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. Локализованные колебательные моды в бездефектном двумерном кристалле состава A_3B // Известия вузов. Физика. – 2008. – Т. 51, №8.
4. Аксенов М.С., Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Локально инициированные упругие волны в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – Т. 2, №3.
5. Старостенков М.Д., Холодова Н.Б., Кондратенко М.Б., Медведев Н.Н., Пожидаева О.В. Возникновение релаксационных волн смещений вблизи точечных дефектов в металлах с ГЦК решеткой. I. Волны смещений вблизи одиночных вакансий // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2008. – Т. 5, №4.
6. Старостенков М.Д., Холодова Н.Б., Кондратенко М.Б., Медведев Н.Н., Пожидаева О.В. Возникновение релаксационных волн смещений вблизи точечных дефектов в металлах с ГЦК решеткой. II. Волны смещений вблизи одиночных внедренных атомов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2009. – Т. 6, №1.
7. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Высокоскоростной массоперенос в двумерном кристалле никеля при наличии дислокационных петель различной локальной плотности // Известия вузов. Черная металлургия. – 2009. – №6.
8. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Потекаев А.И., Кулагина В.В. Высокоскоростной массоперенос в кристаллическом алюминии, содержащем цепочки вакансий и межузельных атомов // Известия вузов. Физика. – 2009. – Т. 52, №9/2.
9. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Захаров П.В. Волны, возникающие при рекомбинации пар Френкеля в двумерных модельных решетках металлов и их влияние на дрейф агрегатов точечных дефектов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2009. – Т. 6, №2.
10. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная структура АФГ и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой $L1_2$ // ФММ. – 1984. – Т. 58, вып. 2.