

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ КООПЕРАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ В МЕТАЛЛАХ ПРИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ИОННОЙ ОБРАБОТКЕ

А.П. Сериков, В.А. Герасимович, О.В. Обидина, М.А. Белая

В данной работе было рассмотрено развитие кооперативных эффектов, которые имеют место в областях локального нарушения плотности. Примером таких областей могут выступать границы раздела фаз и зерен. С помощью метода молекулярной динамики исследовался механизм поведения атомов вблизи границы раздела биметаллов при внедрении комплекса атомов в межузельное пространство компоненты биметалла или образовании вакансий на границе раздела.

Ключевые слова: кооперативные процессы, металлы, границы раздела фаз и зерен.

1. ВВЕДЕНИЕ

Обработка металлов и сплавов в плазме тлеющего разряда приводит к изменению дислокационной структуры вплоть до глубины, значительно превышающей величину проецированных пробегов ионов в облученных материалах (эффект дальнего действия) [1]. Фактически, наблюдается объемная модификация, которая не может быть объяснена в рамках моделей, имеющих в радиационной физике твердых тел.

Ряд авторов, объясняя эффекты дальнего действия, обращают внимание на генерацию упругих или акустических волн при различных видах энергетического воздействия на материал [2, 3]. Волны атомных смещений возникают в процессе релаксации кристаллических структур, содержащих точечные дефекты. В [3, 4] показано, что они являются инициаторами высокоскоростных кооперативных атомных смещений, приводящих к аннигиляции точечных дефектов. Авторы ряда работ предполагают наличие кооперативной природы эффекта дальнего действия [5] и развитие самоорганизационных процессов в кристалле, приводящее к изменению дислокационной структуры и формированию нанокластеров в материале [1].

Для изучения кооперативных явлений в твердом теле широко используется метод компьютерного моделирования, позволяющий проследить развитие явлений, протекающих с высокой скоростью, что практически невозможно сделать в реальном эксперименте. В данной работе использовался метод молекулярной динамики, который по сравнению с другими методами компьютерного моделирования, обладает несколькими важными преимуществами. Он позволяет решать задачи, касающиеся проблем структурно-энергетических трансформаций, как в кристаллических, так и в некристаллических материалах, деформации и аморфизации атомных систем в условиях температурно-силовых воздействий.

В данной работе компьютерный эксперимент выполнялся в двумерном приближении. Простые двумерные модели с использованием метода молекулярной динамики позволяют изучить основные закономерности протекания релаксационных процессов в единичном слое атомов. Для исследования выбиралась наиболее плотноупакованная плоскость кристаллической структуры. Такая двумерная структура является наиболее

стабильной, и миграция атомов происходит преимущественно в плотноупакованных слоях.

2. МЕТОД КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В данной работе проводился компьютерный эксперимент по методу молекулярной динамики с использованием программы [6] и рассматривался механизм поведения атомов вблизи границы раздела биметалла Ni-Fe при внедрении атомов в межузельное пространство компоненты биметалла или образовании вакансий на границе раздела.

Граница в биметалле проходила через середину ячейки, которая представляла собой плоскость (111). Для расчетной ячейки вдоль оси x (направление $\langle 110 \rangle$) задавались периодические граничные условия, а вдоль оси y (направление $\langle 112 \rangle$) – свободные. Число атомов в расчетной ячейке варьировалось от 3240 до 8000 в зависимости от условий эксперимента. Начальная температура ячейки составляла 0 К.

Граница раздела расчетной ячейки подвергалась процедуре релаксации, в результате которой граничные атомы занимали равновесные положения. В течение процесса релаксации наблюдалось увеличение температуры ячейки до нескольких градусов Кельвин. Время релаксации расчетной ячейки составляло 100 пс, а охлаждения – 10 пс. После релаксации из-за различия постоянных решеток в ячейке формировалась граница с характерными вершинными дислокациями несоответствия.

Более наглядно показать вершинные дислокации несоответствия позволяет визуализатор плотноупакованных атомных рядов. Он представляет собой линии, которые соединяют атомы в одном или нескольких плотноупакованных направлениях. Визуализатор атомных смещений является наиболее оптимальным при демонстрации механизма коллективных атомных смещений. Например, при внедрении атома вблизи границы биметалла, происходят направленные атомные смещения в сторону ближайшей вершинной дислокации несоответствия [7].

В рамках проводимых исследований комплексы атомов различной конфигурации внедрялись в межузельное пространство решетки на различных расстояниях от границы биметалла. При этом количество атомов в комплексе варьировалось от 1 до 7. После внедрения комплекса межузельных атомов осуществлялась релаксация ячейки до момента вытеснения атомов комплекса в соседний металл. В процессе релаксации происходил импульсный разогрев ячейки, температура которого зависела от количества внедряемых межузельных атомов.

Известно, что после запуска программы атомы начинают смещаться спустя некоторое время, которое тратится на процесс первоначальной активации эстафетных атомных смещений. В данных исследованиях определялась скорость кооперативных смещений без учета времени на активацию процесса.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В работе [7] было установлено, что внедрение атомов в межузельное пространство никеля биметалла Ni-Al приводит к направленному смещению атомов вдоль направления плотной упаковки до пересечения плотноупакованного ряда с границей раздела металлов и вытеснению атома из крайнего ряда в кристаллическую решетку соседнего металла, при этом смещение атомов происходит в сторону ближайшей дислокации несоответствия. В результате подобного рода эстафетных атомных смещений происходит переползание дислокации на одно межатомное расстояние вглубь решетки Al. Скорость эстафетных атомных смещений зависит от места внедрения атома и удаленности от дислокации несоответствия.

Исследуем процессы, происходящие на границе биметалла Ni-Fe, у которого различие эффективных атомных радиусов Ni и Fe меньше, чем у биметалла Ni-Al. На рисунке 1 приведена граница биметалла Ni-Fe, показанная через визуализатор плотноупакованных рядов, с характерными вершинными дислокациями несоответствия, которых в 2 раза меньше по сравнению с биметаллом Ni-Al.

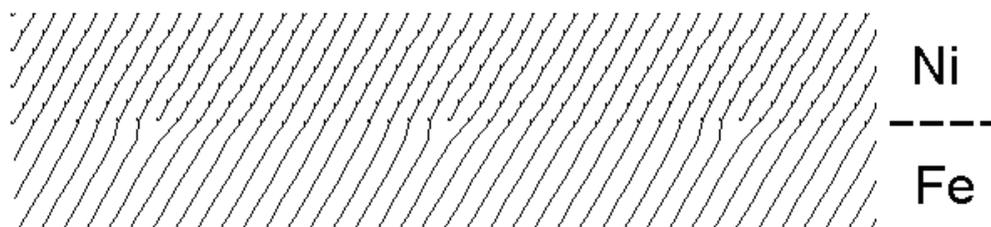


Рис. 1. Граница биметалла Ni-Fe, показанная через визуализатор плотноупакованных рядов

Атомы Ni внедрились в межузельное пространство никеля вдоль направления $\langle 110 \rangle$ на 5 атомном ряду от границы раздела биметалла Ni-Fe. Количество атомов варьировалось от 1 до 7. Время релаксации составляло 50 пс, а начальная температура ячейки 0К.

После релаксации вытеснение атомов из крайнего ряда в соседний металл не происходило, даже при нагреве расчетной ячейки. В зависимости от траектории движения межузельных атомов наблюдалось образование дислокационной петли либо на границе раздела биметалла, либо в решетке никеля.

При введении дополнительного свободного объема, т.е. вакансий на границе раздела биметалла, наблюдалось переползание дислокаций несоответствия вглубь решетки никеля.

При нагреве ячейки с вакансиями на границе раздела биметалла до 300К в отдельных случаях становится возможным вытеснение атомов в соседний металл и переползание дислокации несоответствия вглубь Fe. На рисунке 2 приведен пример релаксационного процесса расчетной ячейки при нагреве ее до 300К.

Таким образом, введение дополнительного свободного объема и нагрев ячейки до 300 К обеспечивает возможность вытеснения атомов Ni в соседний металл и переползание дислокации несоответствия вглубь Fe. Однако данный процесс происходит гораздо медленнее, чем в биметалле Ni-Al. Это обусловлено различием эффективных атомных радиусов компонентов, входящих в биметалл, отношение которых определяет плотность распределения дислокаций несоответствия на границе биметалла.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Скорость кооперативных смещений зависит от количества межузельных атомов и их расположения по отношению к дислокациям несоответствия, от наличия вакансий на границе раздела биметалла, а также от компонент биметалла, т.е. отношения эффективных размеров атомов и эффективных масс компонент. При внедрении комплекса атомов расстояние, на которое происходит переползание дислокации, соответствует межатомному расстоянию, пропорциональному числу внедренных межузельных атомов.

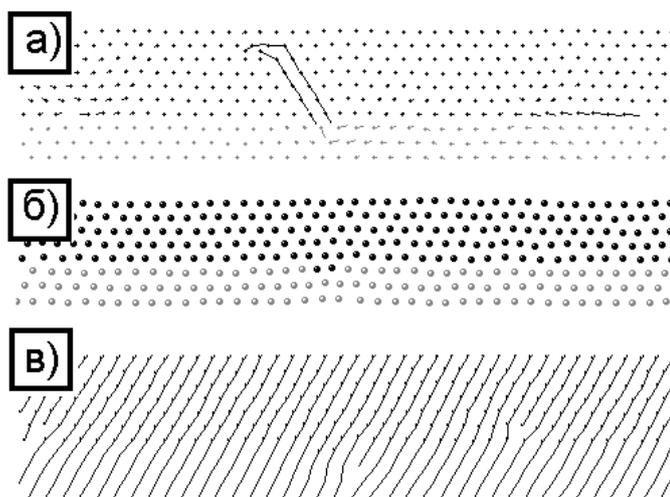


Рис. 2. Конфигурация ячейки биметалла Ni-Fe при внедрении двух атомов Ni в межузельное пространство решетки никеля и при нагреве ее до 300K после релаксации в течение 50 пс: а – смещения в процессе релаксации ячейки; б – результат релаксации ячейки; в – визуализация атомных рядов

Литература

1. Tereshko, I.V. Formation of nanoclusters in metals by the low-energy ion irradiation / I.V. Tereshko, V.V. Abidzina, I.E. Elkin et al. // Surface and Coatings Technology. V. 201, 2007. - P. 8552-8556.
2. Маркидонов, А.В. Механизмы трансформации краудидонных комплексов при прохождении продольной волны / А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, М.Д. Тихонов, А.А. Барчук // Нелинейный мир. Т.9, №12, 2011. – С. 826-835.
3. Медведев, Н.Н. Волны, возникающие при рекомбинации пар Френкеля в двумерных модельных решетках металлов и их влияние на дрейф агрегатов точечных дефектов / Н.Н. Медведев, М.Д. Старостенков, А.В. Маркидонов, П.В. Захаров // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. Т. 6, №2, 2009. – С. 8-13.
4. Старостенков, М.Д. Высокоскоростной массоперенос в кристаллическом алюминии, содержащем цепочки вакансий и межузельных атомов / М.Д. Старостенков, А.В. Маркидонов, Т.А. Тихонова, А.И. Потеев, В.В. Кулагина // Известия вузов. Физика. Т. 52, №9/2, 2009. – С. 139-145.
5. Хмелевская, В.С. Эффект дальнего действия в материалах различной природы / В.С. Хмелевская, И.А. Антошина, М.Н. Кордо // Физика металлов и материаловедение. Т. 103, №6, 2007. – С. 652-656.
6. Полетаев, Г.М. Моделирование методом молекулярной динамики структурно-энергетических превращений в двумерных металлах и сплавах (MD2) / РОСПАТЕНТ свидетельство № 2008610486 от 25.01.2008.
7. Старостенков, М.Д. Взаимодействие краудидона с границей биметаллах Ni-Al в 2D модели / М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, Н.Н. Медведев // Письма о материалах. Т.1, вып. 4, 2011. – С. 238-240.

Сериков Андрей Петрович

Студент электротехнического факультета
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: +375(25) 7387297
E-mail: as.korag@gmail.com

Герасимович Владимир Александрович

Студент машиностроительного факультета
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: +375(44) 7889089
E-mail: vladimir.gerasimovich@yandex.ru

Обидина Ольга Васильевна

Доцент кафедры «Электропривод и АПУ», канд. физ.-матем. наук
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: +375(29) 6466821
E-mail: obidina@tut.by

Белая Марина Александровна

Ассистент кафедры «Металлорежущие станки и инструменты»
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: +375(29) 5439888
E-mail: belay-marina@yandex.by