

М.Д.Старостенков¹, О.В.Обидина², П.В.Захаров¹, А.В.Маркидонов³,
И.А.Дёмина⁴, Г.В.Попова⁴

¹Алтайский государственный технический университет им. И.И.Ползунова, Барнаул, Россия;

²Белорусско-Российский университет, Могилев, Беларусь;

³Новокузнецкий филиал Томского университета, Россия;

⁴Восточно-Казахстанский государственный университет им. С.Аманжолова,
Усть-Каменогорск (E-mail: irdyomina@mail.ru)

Кооперативные смещения комплексов атомов на границе раздела биметаллов Ni-Al, Ni-Fe и Pt-Al

В статье с помощью метода молекулярной динамики исследовано кооперативное смещение комплексов атомов, происходящих по областям, имеющим свободный объём (границы раздела фаз и зерен). В качестве объектов исследования были выбраны биметаллы с различными эффективными размерами атомов и массами компонент. Было показано, что скорость кооперативных смещений зависит от концентрации носителей свободного объема, их расположения по отношению к дислокациям несоответствия, отношения эффективных размеров атомов и эффективных масс компонент.

Ключевые слова: компьютерное моделирование; точечные дефекты; дислокации; межузельные атомы; смещение атомов; эффективный размер атомов, межзеренные границы.

Введение

Многие физические свойства твёрдого тела зависят от числа и строения межзеренных границ, поэтому исследования процессов, происходящих на границе зерен, обусловлены необходимостью объяснить и по возможности влиять на те или иные физико-механические свойства металлов и сплавов. В связи с открытием таких явлений, как эффект «малых доз» [1] и эффект дальнего действия [2] актуальными становятся исследования механизмов переноса дефектов внутри кристалла.

Единая теория, объясняющая эффект дальнего действия, в настоящее время отсутствует. Как правило, модели и механизмы, объясняющие природу эффекта дальнего действия, базируются на предположении о непосредственном переносе тех или иных дефектов, генерируемых в поверхностном слое в более глубокие слои материала.

Ряд авторов, объясняя эффекты дальнего действия, обращают внимание на генерацию упругих или акустических волн при различных видах энергетического воздействия на материал [3–10]. Волны атомных смещений возникают в процессе релаксации кристаллических структур, содержащих точечные дефекты. В [5, 6] показано, что они являются инициаторами высокоскоростных кооперативных атомных смещений, приводящих к аннигиляции точечных дефектов.

Авторы ряда работ предполагают наличие кооперативной природы эффекта дальнего действия [11, 12] и развитие самоорганизационных процессов в кристалле, приводящее к изменению дислокационной структуры и формированию нанокластеров в материале [13, 14].

Для изучения кооперативных явлений в твёрдом 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, основанный на решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений движения Ньютона для системы атомов. Метод молекулярной динамики, 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. Двумерные модели хорошо себя зарекомендовали при исследовании самодиффузии в металлах и механизмов диффузии по границам зерен [15], стабильности межфазных границ в композиционных материалах [16], бездиффузионного механизма массопереноса [5, 6] и многих других задач. Преимуществами двумерных моделей являются наглядность, относительно высокая скорость счёта, относительно большой объём исследуемой структуры и возможность более детального исследования механизмов структурных превращений по сравнению с трехмерными моделями.

Метод компьютерного моделирования

В данной работе проводился компьютерный эксперимент по методу молекулярной динамики с использованием программы [17] и рассматривался механизм поведения атомов вблизи границы раздела биметаллов Ni-Al, Ni-Fe и Pt-Al при внедрении атомов в межузельное пространство компоненты биметалла или образовании вакансий на границе раздела.

Начальная конфигурация расчетной ячейки создавалась в соответствии с [18]. 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 Кельвина. 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, которые приведены на рисунке 1.

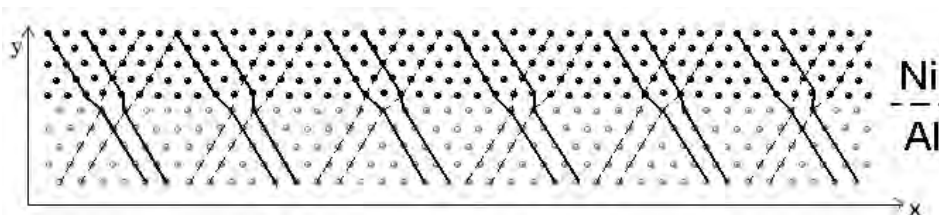


Рисунок 1. Граница раздела биметалла Ni-Al с выделенными дислокациями несоответствия

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 [19]. 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 ходе исследований определялась скорость кооперативных смещений без учета времени на активацию процесса.

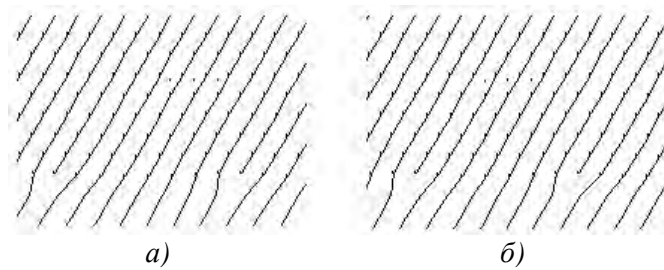
Результаты компьютерного моделирования и их обсуждение

В [19] 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 в глубь решетки Al. Скорость эстафетных атомных смещений зависит от места внедрения атома и удаленности от дислокации несоответствия.

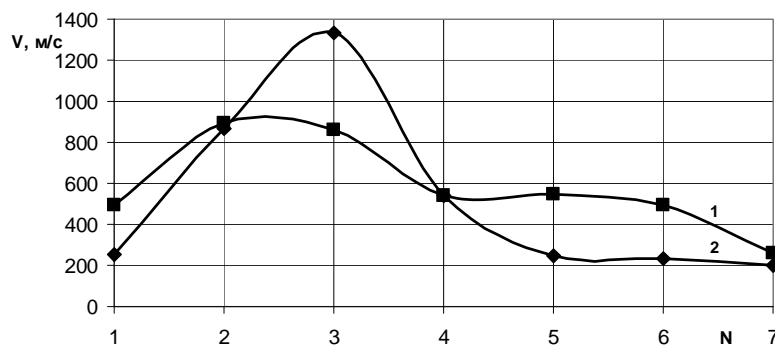
В рамках представленной работы была исследована скорость кооперативных смещений при внедрении комплекса атомов Ni в межузельное пространство никеля вдоль направления $\langle 110 \rangle$ на 5-м атомном ряду от границы биметалла Ni-Al. Межузельные атомы Ni внедрялись в плотноупакованные ряды между дислокациями несоответствия (рис. 2 а) и в область дислокации несоответствия (рис. 2 б).



а — межузельные атомы внедрены в ряды между дислокациями несоответствия;
б — межузельные атомы внедрены вблизи экстраплоскости дислокации несоответствия

Рисунок 2. Внедрение атомов Ni в межузельное пространство никеля биметалла Ni-Al

На рисунке 3 приведены зависимости скорости кооперативных смещений от количества межузельных атомов, внедренных в ряды между дислокациями несоответствия (рис. 2 а) и вблизи экстраплоскости дислокации несоответствия (рис. 2 б). Вид траектории движения комплекса межузельных атомов зависит от количества атомов в комплексе и его расположения по отношению к дислокациям несоответствия. В зависимости от вида траектории различается и время, которое требуется для вытеснения атомов в соседний металл. В случае прямолинейной траектории данный процесс происходит быстрее по сравнению с траекторией, имеющей ломаный характер.



1 — межузельные атомы внедрены в ряды между дислокациями несоответствия (рис. 2 а);
2 — межузельные атомы внедрены вблизи экстраплоскости дислокации несоответствия (рис. 2 б)

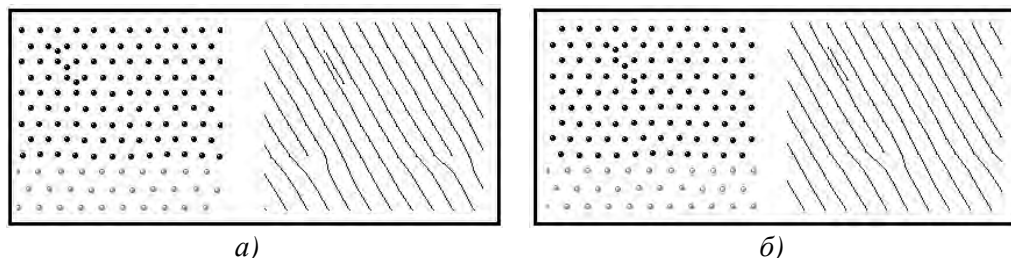
Рисунок 3. Зависимость скорости кооперативных смещений от количества атомов Ni, внедренных в межузельное пространство решетки никеля (комплекс межузельных атомов внедрялся вдоль направления $\langle 110 \rangle$ на пяти межатомных расстояниях от границы раздела биметалла)

Как видно из рисунка 3, скорость кооперативных смещений зависит от количества межузельных атомов, образующих комплекс, а также от расположения этого комплекса по отношению к дислокациям несоответствия. При внедрении межузельных атомов вблизи экстраплоскости дислокации несоответствия скорость кооперативных смещений ниже, чем при внедрении их между экстраплоскостями дислокаций несоответствия. Исключением является случай внедрения комплекса, состоящего из



трех межузельных атомов, расположенного вблизи экстраплоскости дислокации несоответствия (рис. 2 б). При данном способе внедрения скорость кооперативных смещений комплекса атомов составляет 1330 м/с и объясняется прямолинейной траекторией смещения атомов.

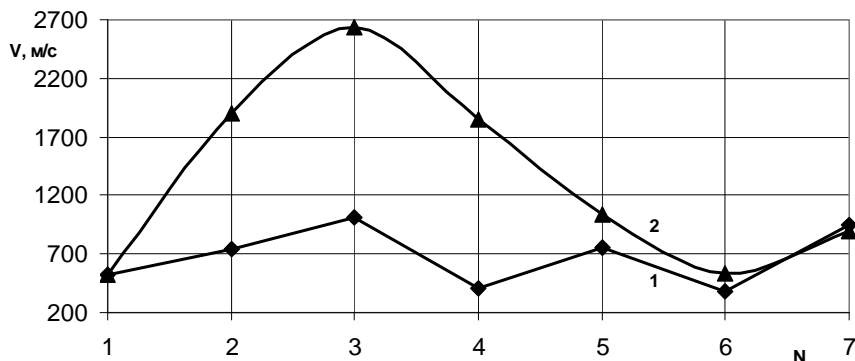
Исследуем скорость кооперативных смещений при внедрении межузельных атомов в плотноупакованный ряд под углом 120° к границе биметалла Ni-Al между экстраплоскостями дислокаций несоответствия (рис. 4 а) и вдоль экстраплоскости дислокации несоответствия (рис. 4 б).



а — межузельные атомы внедрены в плотноупакованный ряд между экстраплоскостями дислокаций несоответствия; б — межузельные атомы внедрены вдоль экстраплоскости дислокации несоответствия

Рисунок 4. Конфигурация ячейки Ni-Al при внедрении комплекса межузельных атомов в плотноупакованный ряд под углом 120°

На рисунке 5 изображена зависимость скорости кооперативных смещений от количества межузельных атомов, внедренных в плотноупакованный ряд под углом 120° . Наибольшая скорость кооперативных смещений (2630 м/с) соответствует комплексу, состоящему из трех атомов, расположенных вдоль экстраплоскости дислокации несоответствия под углом 120° . Следует отметить, что данная скорость кооперативных смещений комплекса атомов составляет 55% скорости звука в никеле.



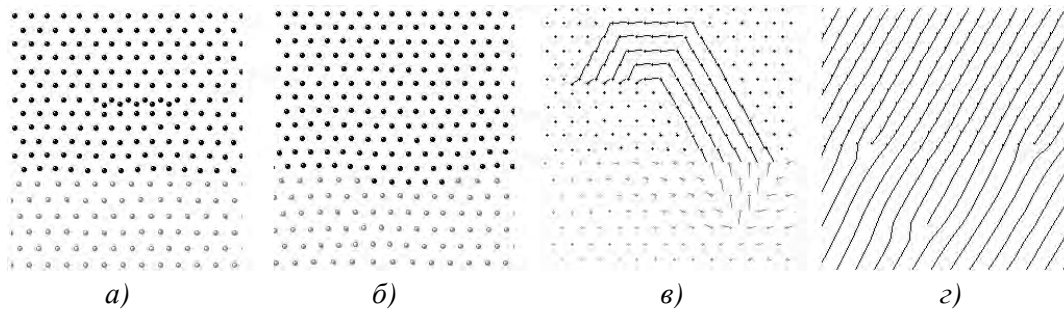
1 — межузельные атомы внедрены в плотноупакованный ряд между экстраплоскостями дислокаций несоответствия (рис. 4 а); 2 — межузельные атомы внедрены вдоль экстраплоскости дислокации несоответствия (рис. 4 б)

Рисунок 5. Зависимость скорости кооперативных смещений от количества атомов Ni, внедренных в межузельное пространство решетки никеля под углом 120° к границе биметалла

Анализируя скорость кооперативных смещений (рис. 3 и 5), можно сделать вывод о ее зависимости от количества внедряемых межузельных атомов и пространственного расположения по отношению к экстраплоскости дислокаций несоответствия.

В результате проведения серии компьютерных экспериментов было установлено, что внедрение комплекса межузельных атомов как вдоль направления $\langle 110 \rangle$, так и под углом 120° приводит к эстафетному смещению атомов вдоль направления плотной упаковки до пересечения плотноупакованного ряда с границей металлов и вытеснению атомов из крайнего ряда в кристаллическую решетку соседнего металла. В результате подобного рода эстафетных смещений дислокация несоответствия пе-

реползает в глубь Al. На рисунке 6 представлены кооперативные смещения комплекса, состоящего из 5 межузельных атомов, внедренных на пяти межатомных расстояниях от границы биметалла.



a — начальное положение атомов; *б* — результат релаксации границы биметалла; *в* — кооперативные атомные смещения в процессе релаксации ячейки; *г* — визуализация атомных рядов, экстраплоскость дислокации несоответствия смещена на пять межатомных расстояний

Рисунок 6. Внедрение 5 межузельных атомов вдоль направления $\langle 110 \rangle$ на пяти межатомных расстояниях от границы биметалла Ni-Al

В результате релаксации ячейки дислокация несоответствия переползла на 5 атомных расстояний в глубь решетки Al. При этом смещение атомов происходит в сторону ближайшей дислокации несоответствия. Таким образом, осуществляется своеобразная аннигиляция дефектов к более выгодному энергетическому состоянию системы.

При внедрении межузельных атомов, отстоящих друг от друга на два межатомных расстояния, также выявлено кооперативное смещение в сторону одной из дислокаций на границе биметалла. Если внедряется свыше 5 атомов, то возможно разделение их на 2 группы и смещение к двум различным дислокациям несоответствия [20]. Такое кооперативное поведение наблюдалось при внедрении межузельных атомов не далее 10 межатомных расстояний от границы биметалла Ni-Al.

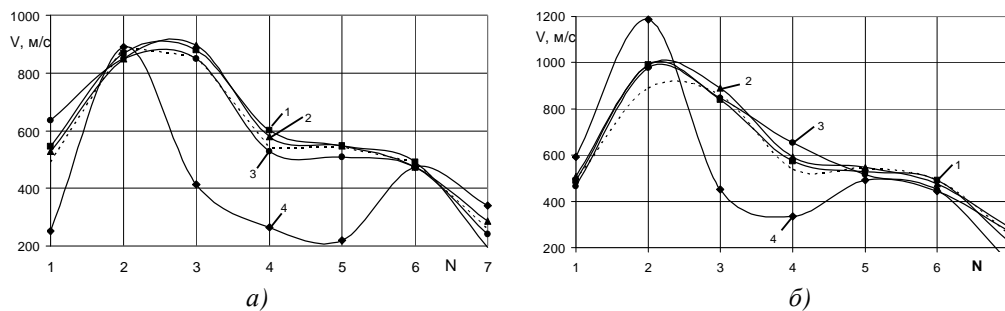
Исследование произвольного расположения комплексов межузельных атомов показало, что в данном случае также наблюдаются эстафетные смещения, но на это затрачивается больше времени. При этом на начальном этапе релаксации структуры смещения атомов могут происходить не только вдоль плотноупакованных направлений. Наблюдаются кольцевые смещения атомов, которые могут быть обусловлены эстафетными смещениями атомов в процессе релаксации ячейки [20].

Следует отметить, что кольцевой механизм перемещения атомов в данном случае реализовывался при более низких температурах по сравнению с бездефектными кристаллами. Для идеального кристалла чистого никеля кольцевые перемещения атомов были обнаружены только при температуре 1700K [21], а в рамках данного компьютерного эксперимента температура ячейки составляла $\sim 210\text{K}$.

Таким образом, характер атомных смещений зависит от числа межузельных атомов. При этом расстояние, на которое происходит переползание дислокации, соответствует межатомному расстоянию, пропорциональному числу внедренных межузельных атомов.

Исследуем влияние дополнительного свободного объема на процессы, происходящие на границе биметалла Ni-Al. В качестве носителей свободного объема выберем вакансии, которые будут располагаться на границе биметалла. Количество образуемых вакансий варьировалось от 1 до 4. Исследовалась зависимость скорости кооперативных смещений от количества атомов, внедряемых в межузельное пространство никеля на 5-м атомном ряду (согласно рис. 2 *a*) при введении вакансий на границе биметалла. Данные зависимости приведены на рисунке 7.

Анализируя зависимости, приведенные на рисунке 7, можно сделать вывод о том, что не во всех случаях введение дополнительного свободного объема ведет к увеличению скорости кооперативных смещений. Это, прежде всего, связано с тем, что в расчетной ячейке инициируются дополнительные смещения атомов, тем самым время вытеснения атомов в соседний металл увеличивается.



a — вакансии образованы со стороны никеля; *б* — вакансии образованы со стороны алюминия

Рисунок 7. Зависимость скорости кооперативных смещений от количества атомов Ni, внедренных в межузельное пространство решетки никеля при наличии вакансий на границе биметалла (номер кривой соответствует количеству образованных вакансий; штриховой кривой соответствует скорость кооперативных смещений в отсутствие вакансий)

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 8 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.

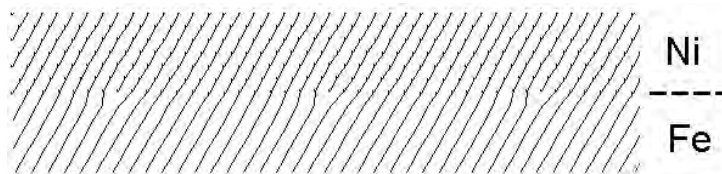
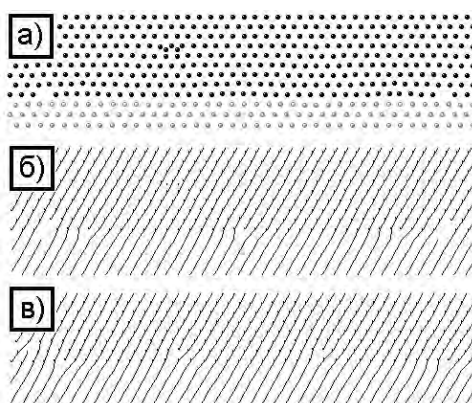


Рисунок 8. Граница биметалла Ni-Fe, показанная через визуализатор плотноупакованных рядов

Атомы Ni внедрялись в межузельное пространство никеля вдоль направления $\langle 110 \rangle$ на 5-м 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 вытеснения 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 в глубь решетки никеля. На рисунке 9 приведена начальная конфигурация ячейки (рис. 9 *a* и *б*) и после релаксации (рис. 9 *в*), показанная через визуализатор плотноупакованных рядов.

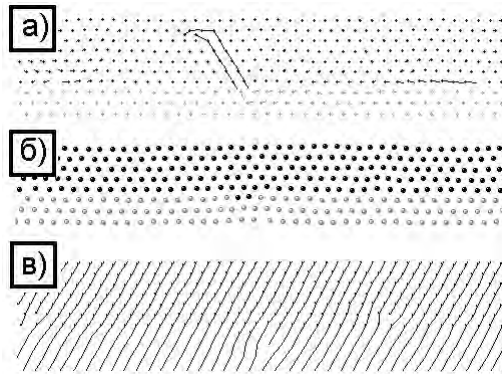


a — расчетная ячейка с двумя межузельными атомами Ni и двумя вакансиями на границе раздела биметалла;
б — расчетная ячейка, показанная через визуализатор плотноупакованных рядов;
в — ячейка после релаксации в течение 50 пс

Рисунок 9. Ячейка биметалла Ni-Fe при внедрении двух атомов Ni в межузельное пространство 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 в глубь Fe. На рисунке 10 приведен пример релаксационного процесса расчетной ячейки, конфигурация которой изображена на рисунке 9 *a*, при нагреве ее до 300К.

Таким образом, введение дополнительного свободного объема и нагрев ячейки до 300 К обеспечивают возможность вытеснения атомов Ni в соседний металл и переползание дислокации несоответствия в глубь 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.



a — смещения в процессе релаксации ячейки; *б* — результат релаксации ячейки;
в — визуализация атомных рядов

Рисунок 10. Конфигурация ячейки биметалла Ni-Fe при нагреве ее до 300К после релаксации в течение 50 пс

Рассмотрим процессы, происходящие на границе биметалла, у которого массы атомов компонентов существенно различны, на примере биметалла Pt-Al. На рисунке 11 приведена конфигурация ячейки Pt-Al, показанная с помощью визуализатора плотноупакованных рядов. Начальная температура расчетной ячейки составляла 0К.

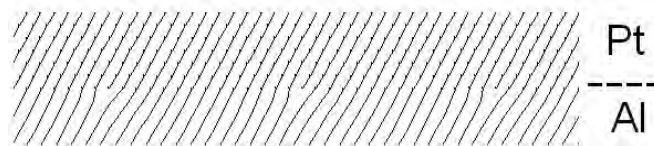


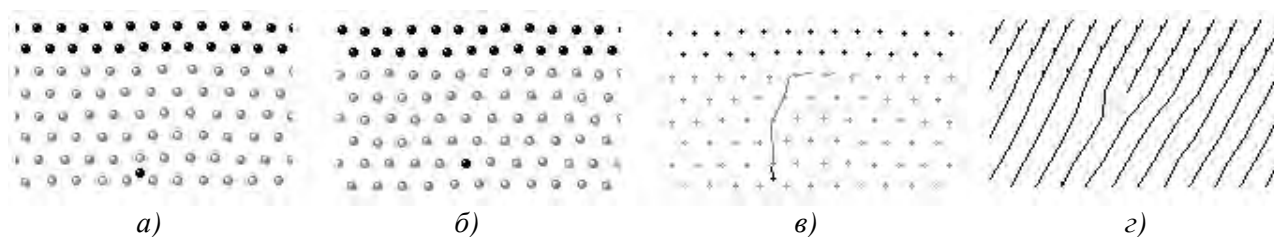
Рисунок 11. Граница раздела биметалла Pt-Al, показанная с помощью визуализатора плотноупакованных рядов

Один атом Pt или Al внедрялся в межузельное пространство платины на 5 атомном ряду от границы раздела биметалла. После релаксации ячейки в течение 50 пс наблюдалось появление ступеньки на границе раздела, при этом дислокация несоответствия переползала в глубь Al. При увеличении количества внедряемых атомов, в процессе релаксации, помимо образования ступеньки и точечных дефектов замещения на границе раздела биметалла, наблюдается образование вакансий в решетке платины.

При внедрении атома Al в межузельное пространство алюминия на 5-м атомном ряду от границы раздела биметалла в результате релаксации ячейки происходит смещение атомов к границе биметалла, при этом дислокация несоответствия переползает в глубь Al.

На рисунке 12 приведен результат релаксации границы биметалла при внедрении атома Pt в межузельное пространство Al. Внедренный атом инициирует смещение атомов Al к границе биметалла к ближайшей дислокации несоответствия, которая при этом переползает на одно межатомное расстояние в глубь Al.





a — начальное положение атомов; *б* — результаты релаксации границы биметалла; *в* — атомные смещения в процессе релаксации ячейки; *г* — визуализация атомных рядов

Рисунок 12. Релаксация расчетной ячейки Pt-Al при внедрении атома Pt в межузельное пространство Al на 5-м атомном ряду

Следует отметить, что на развитие и скорость кооперативных смещений влияет соотношение эффективных масс и эффективных размеров атомов. В таблице приведены данные соотношения для рассматриваемых биметаллов Ni-Al, Ni-Fe и Pt-Al [22].

Т а б л и ц а

Физические характеристики биметаллов

Тип биметалла	Отношение эффективных размеров атомов	Отношение эффективных масс компонент
Ni-Al	0,87	2,2
Ni-Fe	0,90	1,05
Pt-Al	0,97	7,23

Отношение эффективных размеров атомов тяжелой решетки к эффективному размеру атомов легкой решетки определяет плотность распределения вершинных дислокаций несоответствия вдоль границы биметалла. При внедрении атома в одноименную часть компонента биметалла с наибольшей эффективной массой скорость кооперативных смещений больше, чем больше отношение эффективных масс компонент.

Заключение

Таким образом, 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 этом скорость кооперативных смещений может составлять до 55% скорости звука в материале. При внедрении комплекса атомов расстояние, на которое происходит переползание дислокации, соответствует межатомному расстоянию, пропорциональному числу внедренных межузельных атомов.

References

- 1 Mamontov A.P., Chernov I.P. *Small dose effect of ionizing radiation*, Moscow: Energoatomizdat, 2001, 286 p.
- 2 Didenko A.N., Sharkeev Yu.P., Kozlov E.V. et al. *The effects of long-range interaction in ion-implanted metallic materials*, Tomsk: Publishing House NTL, 2004, 328 p.
- 3 Starostenkov M.D., Kholodova N.B., Kondratenko M.B. et al. *Initiation of relaxation waves of displacement near point defects in fcc metals. I. Displacement wave near single vacancies* // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science), 2008, vol. 5, № 4, p. 117–120.
- 4 Starostenkov M.D., Kholodova N.B., Kondratenko M.B. et al. *Initiation of relaxation waves of displacement near point defects in fcc metals. II. Displacement wave near interstitial atoms* // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science), 2009, vol. 6, № 1, p. 105–107.
- 5 Starostenkov M.D., Markidonov A.V., Tichonova T.A. et al. *High-speed mass transfer in nickel two-dimensional crystal in the presence of dislocation loops with various local density* // Izvestiya VUZ. Chernaya Metallurgiya (Steel in Translation), 2009, № 6, p. 57–60.
- 6 Starostenkov M.D., Markidonov A.V., Tichonova T.A. et al. *High-speed mass transfer in crystal aluminium containing chains of vacancies and interstitials atoms* // Russian Physics Journal, 2009, vol. 52, № 9–2, p. 139–145.



- 7 Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Markidonov A.V. et al. *Waves generated by recombination of Frenkel pairs in the two-dimensional model metal lattices and their impact on the drift of point defects aggregates* // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science), 2009, vol. 6, № 2, p. 8–13.
- 8 Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Abidzina V.V. *Vacancies aggregations initiated by post-cascade shock waves* // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science), 2012, vol. 9, № 4, p. 548–555.
- 9 Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Tichonova T.A. et al. *Mechanisms of transformation the crowdions aggregates at passage of a longitudinal wave* // Nelineynyiy mir, 2011, vol. 9, № 12, p. 826–835.
- 10 Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Barchuk A.A. et al. *Features of the dynamics crowdions in crystals with the lattice at various power influences* // Khimicheskaja fizika i mezoskopija, 2012, vol. 14, № 1, p. 46–53.
- 11 Khmelevskaya V.S., Malynkin V.G. *Long-range effect and collective processes in metals* // Vestnik NNGU, Ser. Fiz. Tverd. Tela, 2003, vol. 1 (6), p. 173–182.
- 12 Khmelevskaya V.S., Antoshina I.A., Kordo M.N. *Effect of long-range action in materials of different nature* // The Physics of Metals and Metallography, 2007, vol. 103, №6, p. 652–656.
- 13 Tereshko I.V., Abidzina V.V., Elkin I.E. et al. *Formation of nanoclusters in metals by the low-energy ion irradiation* // Surface and Coatings Technology, 2007, vol. 201, p. 8552–8556.
- 14 Tereshko I., Abidzina V., Tereshko A. et al. *Nanostructural evolution of steel and titanium alloys exposed to glow discharge* // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B., 2007, vol. 261, p. 678–681.
- 15 Rakitin R.Y., Poletaev G.M., Aksenov M.S. et al. *Investigation of the diffusion mechanism along grain inclination boundary in fcc metals* // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science), 2005, vol. 2, № 2, p. 124–129.
- 16 Starostenkov M.D., Popova G.V., Poletaev G.M. et al. *Temperature ranges of phase-boundary stability in two-dimensional Ni3Al-Ni composite* // Izvestiya VUZ. Chernaya Metallurgiya (Steel in Translation), 2006, № 6, p. 24–27.
- 17 Poletaev G.M. *Molecular dynamics simulations of structural and energy transformation in two-dimensional metals and alloys (MD2)*. Certificate № 2008610486 of 25.01.2008.
- 18 Poletaev G.M. *Research of mutual diffusion processes in two-dimensional system Ni-Al: Candidate's Dissertation in Physical and Mathematical Sciences*, Barnaul, 2002, 186 p.
- 19 Starostenkov M.D., Zacharov P.V., Medvedev N.N. *Crowdion interaction with bimetallic Ni-Al boundary in 2D-model composite* // Letters on Materials, 2011, № 4, p. 238–240.
- 20 Zacharov P.V., Starostenkov M.D., Medvedev N.N. et al. *Cooperative behavior of interstitial atoms in the field of misfit dislocation at the interface of bimetallic Ni-Al* // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science), 2012, vol. 9, № 4, p. 431–435.
- 21 Kholodova N.B. *Point defects and their role in the disordering process of 2-dimensional intermetallic Ni3Al: Candidate's Dissertation in Physical and Mathematical Sciences*, Barnaul, 2007, 233 p.
- 22 Zacharov P.V. *Cooperative effect under interaction of dynamic and topological solitons with defects in various model crystal lattices based on the fcc structure: Candidate's Dissertation in Physical and Mathematical Sciences*, Barnaul, 2012, 165 p.

М.Д.Старостенков, О.В.Обидина, П.В.Захаров, А.В.Маркидонов,
И.А.Дёмина, Г.В.Попова

Ni-Al, Ni-Fe және Pt-Al биметалдар бөлімі шегіндегі атомдар кешенінің кооперативті жылжуы

Молекулярлық динамика әдісінің көмегімен бос көлемді аумақтардағы атомдар кешенінің кооперативті жылжуы зерттелді. Зерттеу объектісі ретінде әр түрлі әсерлі өлшемдегі атомдары мен салмақ құрауыштары бар биметалдар таңдалды. Кооперативті жылжу жылдамдығы бос көлемді тасымалдаушының тұнбасына, олардың сәйкессіздік дислокацияға қатысты орналасуына, әсерлі және әсерлі салмақ құрауыштарының қатынасына тәуелді екендігі көрсетілген.

M.D.Starostenkov, O.V.Obidina, P.V.Zakharov, A.V.Markidonov,
I.A.Dyomina, G.V.Popova

Cooperative displacements of atom complexes at the interface of bimetallic Ni-Al, Ni-Fe and Pt-Al

Cooperative displacement of atom complexes that takes place along areas having free volume (interphase and grain boundaries) was observed using molecular dynamics method. Bimetals with various effective dimensions of atoms and masses of the components were chosen as objects for the investigation. It was shown that the rate of cooperative displacements depends on concentration of free volume carriers, their location against misfit dislocations, the ratio of effective dimensions of atoms and masses of the components.

