Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. Д. Старостенков, А. В. Маркидонов, Н. Н. Медведев, Т. А. Тихонова, Моделирование переноса массы в виде рядов вакансий и межузельных атомов на примере двумерного кристалла, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2010, выпуск 1(), 249–252

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu753>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.219.12

26 апреля 2023 г., 07:58:45

УДК 669.018

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА МАССЫ В ВИДЕ РЯДОВ
ВАКАНСИЙ И МЕЖУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ НА ПРИМЕРЕ
ДВУМЕРНОГО КРИСТАЛЛА*М. Д. Старостенков*¹, *А. В. Маркидонов*², *Н. Н. Медведев*³,
*Т. А. Тихонова*²¹ Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова,
656099, Барнаул, пр-т Ленина, 46.² Кузбасская государственная педагогическая академия,
654027, Новокузнецк, пр. Пионерский, 13.³ Бийский педагогический государственный университет им. В. М. Шукшина,
659333, Алтайский край, Бийск, ул. Короленко, 53.

E-mail: markidonov_artem@mail.ru

Методом молекулярной динамики исследована динамика структурной перестройки, происходящей в процессе релаксации двумерного кристалла при введении в его структуру сгруппированных точечных дефектов, располагающихся в плотноупакованных направлениях типа $\langle 110 \rangle$. Показано, что процесс релаксации состоит из нескольких этапов.

Ключевые слова: кристалл, релаксация, точечные дефекты, компьютерное моделирование.

Известно, что при различном воздействии на кристаллическую структуру, например, радиационным воздействием или ударной деформацией, в ней образуются различные конфигурации точечных дефектов [1, 2]. Это приводит к неравномерному локальному перераспределению массы. Структура кристаллической решётки при наличии в ней дефекта претерпевает определенные искажения за счёт смещения атомов в упругих полях. И тогда вакансию, например, можно рассматривать как центр сжатия, а межузельный атом — как центр растяжения в упругой среде [3]. При их аннигиляции происходит перераспределение недостающей и избыточной масс, и идеальность кристалла восстанавливается. В данной работе рассматривается динамика структурной перестройки, происходящей в процессе релаксации кристалла при введении в его структуру точечных дефектов, сгруппированных в ряды.

Эксперимент проводился на прямоугольном расчётном блоке, имитирующем двумерный кристалл с упаковкой атомов, соответствующей плоскости {111}. Взаимодействие между атомами описывалось с помощью парного потенциала Морза

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

где D — энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы; α — параметр, определяющий жёсткость межатомных связей; $\beta = e^{\alpha r_0}$; r_0 — некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами. Значение параметров потенциала брались из [4]. Применение простого полуэмпирического потенциала является оправданным, так как упругие нелинейные характеристики взаимодействия определяются объёмным модулем упругости, по которому достаточно точно подгонялись параметры потенциала. Взаимодействие между атомами ограничивалось шестью первыми

Михаил Дмитриевич Старостенков (д.ф.-м.н., профессор), зав. кафедрой, каф. общей физики. *Артём Владимирович Маркидонов*, аспирант, каф. физики и методики преподавания физики. *Николай Николаевич Медведев* (к.ф.-м.н., доцент), доцент, каф. физики. *Татьяна Александровна Тихонова*, ст. преподаватель, каф. физики и методики преподавания физики.

координационными сферами. Компьютерный эксперимент выполнялся по методу молекулярной динамики с использованием программы [5]. За пределами области расчётный блок повторялся введением периодических граничных условий. После конструирования расчётного блока включалась процедура релаксации структуры посредством разогрева возле 0 К. Через определенные интервалы времени фиксировалось изменение структуры кристалла, происходящее в процессе релаксации без диссипации энергии за пределы расчётного блока.

В работе применялись визуализаторы атомных смещений, при необходимости их масштаб был увеличен. Исследовались следующие параметры: изменение энергии, приходящейся на один атом в зависимости от времени релаксации; время, в течение которого происходит полная аннигиляция вакансий и межузельного атома, т. е. исчезают источники локального изменения плотности материала; температура расчётного блока. Эти параметры исследовались для блоков с рядами дефектов различной длины, различной конфигурации и на различных расстояниях друг от друга.

Рассмотрим конкретный пример. В двумерный расчётный блок чистого алюминия, включающий в себя 1600 атомов, введено десять вакансий и межузельных атомов. Точечные дефекты сгруппированы в ряды, располагающиеся симметрично вдоль плотноупакованных направлений типа $\langle 110 \rangle$ (см. рис. 1). Такое расположение дефектов приводит к образованию равных по размеру областей с локальным изменением массовой плотности m^+ и m^- .

Рис. 1. Начальная конфигурация расчётного блока (слева) и последующие атомные смещения (справа)

Как видно из рис. 1, межузельные атомы в процессе эксперимента смещают упаковку соседей по краудионному механизму, и происходит аннигиляция дефектов.

Кооперативные смещения групп краудионов, соответствующих числу межузельных атомов, являются энергетически более выгодными по сравнению со смещениями одиночных атомов. Процесс релаксации наглядно показывает самоорганизацию системы из хаоса в упорядоченное смещение коллектива атомов. В результате в исследуемом блоке кристалла исчезают области неоднородного распределения локальной плотности m^+ и m^- .

Следует отметить, что помимо прямолинейных траекторий атомных смещений, наблюдаемых при данной конфигурации расчётного блока, могут наблюдаться и ломаные траектории. Так, например, при расположении цепочек дефектов вдоль кристаллографического направления $\langle 011 \rangle$ кооперативные атомные смещения меняли направление своего движения три раза [6].

Процесс релаксации состоит из нескольких этапов. В самом начале релаксации возникают ударные волны. Наиболее ярко это проявляется со стороны ряда межузельных атомов (рис. 2, а).

Расчёты показывают, что этому моменту соответствует пик температуры рас-

Рис. 2. Атомные смещения в различные интервалы времени: а) 0 – 0,2 пс; б) 0,28 – 0,3 пс (смещения увеличены в 20 раз)

чётного блока, что естественно, так как в методе молекулярной динамики скорость атомов неразрывно связана с температурой. Также отмечается резкое возрастание по модулю энергии, приходящейся на один атом. Затем данные параметры с затухающими осцилляциями изменяются к некоторым средним уровням.

В дальнейшем образуется продольная волна, распространяющаяся по кристаллу с гораздо меньшими амплитудами колебаний атомов (рис. 2, б). Эксперимент в [7] показывает, что данная волна в дальнейшем трансформируется в звуковую. В случае, если интервалы времени увеличить, можно наблюдать вихревые смещения.

Надо отметить, что процесс смещения упаковки соседей межузельным атомом происходит со скоростями, превышающими скорость звука в данном кристалле. Эта скорость различна для разных ГЦК металлов, но во всех случаях больше скорости звука. С увеличением расстояния между рядами дефектов скорость развития этих смещений падает, а с увеличением числа дефектов, наоборот, возрастает. Также возрастает и интенсивность начальных ударных волн в процессе релаксации. Кроме этого, рост скорости смещений отмечается и при увеличении начальной температуры расчётного блока.

Таким образом, можно сделать вывод, что наличие в структуре материала близко расположенных областей с разными знаками массовой плотности может привести к высокоскоростным кооперативным атомным смещениям.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Physical Metallurgy / ed. R. W. Cahn. — Amsterdam: Univ. Sussex, 1965. — 323 p.; русск. пер.: Физическое металловедение / ред. Р. В. Кан. — М.: Мир, 1968. — 490 с.
2. Shock Waves and High-Strain Rate Phenomena in Metals — Concepts and Application / ed. M. A. Meyers and L. E. Murr. — New York: Plenum Press, 1981; русск. пер.: Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов / ред. М. А. Мейерс, Л. Е. Мур. — М.: Металлургия, 1984. — 512 с.
3. Новиков И. И. Дефекты кристаллического строения металлов. — М.: Металлургия, 1983. — 232 с.
4. Царегородцев А. И., Горлов Н. В., Демьянов Б. Ф., Старостенков М. Д. Атомная структура АФГ и ее влияние на состояние решётки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой $L1_2$ // Физика металлов и металловедение, 1984. — Т. 58, № 2. — С. 336–343.
5. Полетаев Г. М. Моделирование методом молекулярной динамики структурно-энергетических превращений в двумерных металлах и сплавах (MD2): Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2008610486 от 25.01.2008.
6. Старостенков М. Д., Маркидонов А. В., Тихонова Т. А. Нелинейный высокоскоростной

массоперенос в двумерном кристалле при наличии локальных областей с различной плотностью // *Ползуновский альманах*, 2008. — № 3. — С. 226–228.

7. Старостенков М.Д., Холодова Н.Б., Кондратенко М.Б., Медведев Н.Н., Пожсидаева О.В. Возникновение релаксационных волн смещений вблизи точечных дефектов в металлах с ГЦК решёткой. I. Волны смещений вблизи одиночных вакансий // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, 2008. — № 4. — С. 117–120.

Поступила в редакцию 27/VII/2009;
в окончательном варианте — 23/X/2009.

MSC: 70G60, 74E15

THE MASS TRANSFER SIMULATION AS THE LINE OF VACANCIES AND INTERSTITIAL ATOMS IN THE MODEL OF 2D CRYSTAL

*M. D. Starostenkov*¹, *A. V. Markidonov*², *N. N. Medvedev*³,
*T. A. Tikhonova*²

¹ Altay State Technical University,
46, prosp. Lenina, Barnaul, 656099.

² Kuzbass State Pedagogical Academy,
13, prosp. Pionerskiy, Novokuznetsk, 654027.

³ Biysk Pedagogical State University,
53, Korolenko str., Biysk, Altayskiy kray, 659333.

E-mail: markidonov_artem@mail.ru

The dynamics of structural change in the process of 2D crystal relaxation is researched with molecular dynamics method. Packed point defects which are located in the <110> close-packed directions were injected into the structure of the crystal. It is shown that the process of relaxation consists of several phases.

Key words: *crystal, relaxation, point defects, computer modeling.*

Original article submitted 27/VII/2009;
revision submitted 23/X/2009.

Mikhail D. Starostenkov (Dr. Sci. (Phys. & Math.)), Head of Dept., Dept. of General Physics. *Artyom V. Markidonov*, Postgraduate Student, Dept. of Physics and Methods of Teaching Physics. *Nikolay N. Medvedev* (Ph. D. (Phys. & Math.)), Associate Professor, Dept. of Physics. *Tatiana A. Tikhonova*, Lecturer, Dept. of Physics and Methods of Teaching Physics.