

НЕЛИНЕЙНЫЙ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ МАССОПЕРЕНОС В ДВУМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ ПРИ НАЛИЧИИ ЛОКАЛЬНЫХ ОБЛАСТЕЙ С РАЗЛИЧНОЙ ПЛОТНОСТЬЮ

М.Д. Старостенков, А.В. Маркидонов, Т.А. Тихонова

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
г. Барнаул, Россия

Введение

Известны ряд работ, посвященных описанию перераспределения массы пластическими сдвигами в континуальной среде. Области повышенной и пониженной массовой плотности (м-области) [1] образуются на неоднородностях функции распределения сдвиговых смещений.

Неоднородности смещений имеются и в атомарной среде, хоть и в значительно меньших масштабах. Если в смещениях задействована значительная часть атомов, и эти смещения подчиняются законам, то можно говорить о коллективных движениях.

Коллективное движение атомов играет значительную роль в пластической деформации материала. Кроме того, коллективное движение приводит к неравномерному распределению атомов кристаллической решетки, ослабленной точечными дефектами. Вокруг таких дефектов происходит ее искажение. В таком случае вакансию можно рассматривать как центр сжатия, а межузельный атом – как центр расширения в упругой среде [2]. Стенка же вакансий или межузельных атомов будет представлять собой уже область дилатации атомной структуры. При аннигиляции дефектов происходит перераспределение избыточной и недостающей массы, и идеальность материала восстанавливается. Целью данной работы является рассмотрение процесса массопереноса при аннигиляции стенки вакансий и стенки межузельных атомов путем компьютерного эксперимента.

Методика компьютерного эксперимента

Стенки вакансий и межузельных атомов одинакового размера располагаются в кристалле симметрично. Такое расположение приводит к возникновению одинаковых по размерам, но разных по знаку м-областей с локальным изменением плотности или локального объема.

Компьютерный эксперимент выполнялся с использованием метода молекулярной динамики, с использованием программы, разработанной в [3]. В качестве объекта исследования был взят расчетный блок двумерного кристалла Al, представляющий собой прямоугольник размером $N_x = 40$ и $N_y = 76$ атомов. К границам расчетного

блока прикладывались периодические граничные условия. Взаимодействия между атомами задавались в форме эмпирического парного потенциала Морза с параметрами, взятыми из [4]. Затем вдоль кристаллографического направления $\langle 011 \rangle$ вводились точечные дефекты – вакансии и межузельные атомы, образуя двадцать пар Френкеля (рис. 1). Затем включалась процедура релаксации структуры с использованием метода молекулярной динамики посредством разогрева кристалла на небольшой уровень температуры вблизи 0 К. Через определенные интервалы времени просматривалось изменение структуры, происходящее в процессе релаксации. Можно заметить, что на первых этапах возникали вихревые смещения атомов в зоне, где была создана локально увеличенная плотность масс (m^+), т.е. в зоне, где были собраны межузельные атомы или образована дислокация. Затем более слабые смещения были обнаружены в области дислокаций другого знака, там, где локальная плотность массы была (m^-) (рис. 2). Процесс структурной перестройки кристалла продолжался в течении достаточно малого промежутка времени – 0,8 пс компьютерного эксперимента. За это время за счет кооперативных перемещений посредством эстафетного механизма большинство межузельных атомов сдвинули упаковку соседей так, что произошла аннигиляция точечных дефектов, т.е. исчезли области локального распределения масс в кристалле со знаками (m^+) и (m^-). Картины смещений атомов по завершению данного процесса представлены на рис. 3. Стрелками показано, что на первом этапе происходят эстафетные смещения в направлении типа $\langle 101 \rangle$, затем следует их поворот в направлении $\langle 011 \rangle$ и коллективное перемещение в данном направлении. На границе расчетного блока атомы коллективно ступенчато на один шаг смещаются в направлении $\langle 101 \rangle$, и вновь следует поворот их в направлении, отличающемся от $\langle 011 \rangle$ на 60° . На этом эстафетный механизм завершается аннигиляцией вакансий и межузельных атомов. Остаются только последние, двадцатые вакансии и межузельный атом, которые создают дислокацию внутри расчетного блока кристалла (рис. 3).

НЕЛИНЕЙНЫЙ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ МАССОПЕРЕНОС В ДВУМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ ПРИ НАЛИЧИИ ЛОКАЛЬНЫХ ОБЛАСТЕЙ С РАЗЛИЧНОЙ ПЛОТНОСТЬЮ

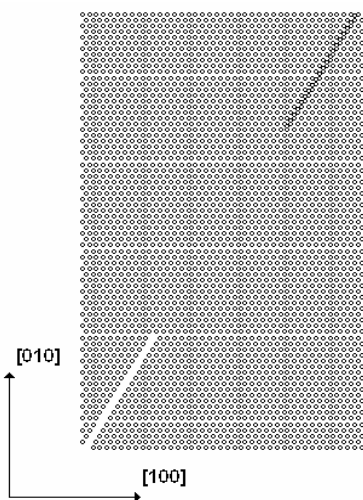


Рисунок 1 - Конфигурация атомной решетки в начальный момент времени эксперимента

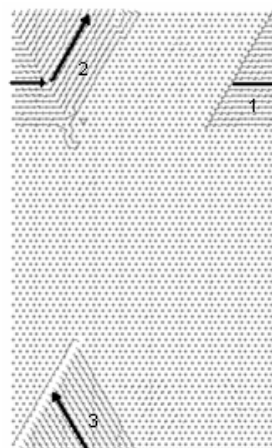


Рисунок 3 - Начальная конфигурация с последующими атомными смещениями. Стрелками показана схема коллективного движения межузельных атомов

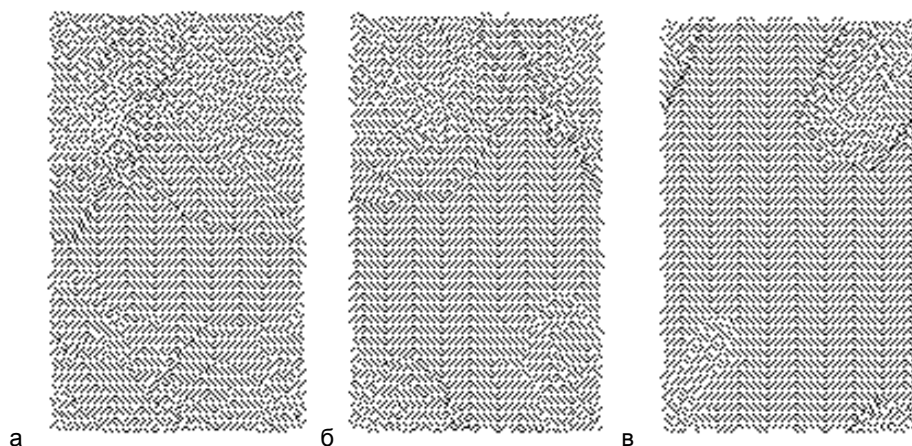


Рисунок 2 - Конфигурация атомной решетки через 0.25 Пс (а), 0.5 Пс (б) и 0.75 Пс (в) времени компьютерного эксперимента

На рис. 4 показана картина изменения энергии на один атом в зависимости от времени. Как видно из рисунка, аномальный рост энергии отмечается в начале эксперимента, затем энергия резко уменьшается и выходит на некоторый средний уровень через 1,5 пс.

Были вычислены скорости кооперативных смещений атомов, приводящих к аннигиляции вакансий и межузельных атомов. За время аннигиляции принималось время, когда атомные ряды смыкались, т.е. при наложении изображений атомных рядов, не оставалось пустоты. Затем по схеме на рис. 2 рассчитывалось число атомов принимавших участие в смещениях, и принимал, что именно такое расстояние проходит межузельный атом до аннигиляции. Двадцатая вакансия (счет ведется снизу вверх) связана

с образующейся дислокацией, которая затем начинает двигаться по кристаллу, поэтому время аннигиляции этой вакансии и расстояние, пройденное атомом, вычислить для меня затруднительно.

На рис. 5 показан график зависимости скорости аннигиляции пар Френкеля в зависимости от их порядковых номеров. Как видно из рисунка, только первые пары имеют скорость, близкую к скорости звука, затем следует нарастание скорости, и к пятой паре устанавливается скорость, превышающая более чем в три раза скорость звука.

Таким образом, можно сделать вывод, что при наличии в кристалле градиентов плотности или градиентов масс в нем возможны возбуждения кооперативных смещений атомов подобно действию фононного мазера [5]

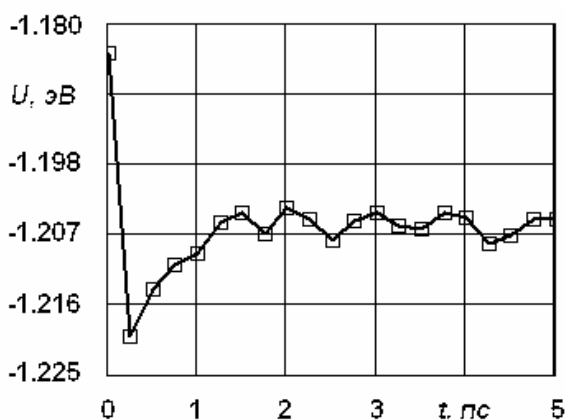


Рисунок 4 - Зависимость средней энергии атома от времени эксперимента (Первое значение при $t = 0$ пс)

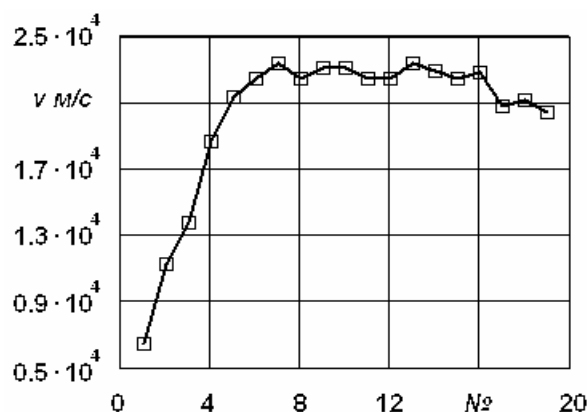


Рисунок 5 - Зависимость скорости межузельного атома от его порядкового номера (нумерация для межузельных атомов ведется сверху вниз)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Неверов В.В., Антоненко А.И. Теория пластических сдвигов. Перенос массы. Скачки. – Новокузнецк: Изд-во КузГПА, 2005. – 194 с.
2. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. - М.: Металлургия, 1983. - 232 с.
3. 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.
4. 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, с.336-343.
5. Кащенко М.П. Волновая модель роста мартенсита при $\gamma - \alpha$ превращении в сплавах на основе железа. – Екатеринбург: УИФ «Наука», 1993. 224 с.