

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ ВНЕДРЕНИЯ В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ СОСТАВА A_3B

М.Д. Старостенков, Е.А. Дудник

Введение

Точечные дефекты внедрения относятся к категории высокоэнергетических точечных дефектов. Поэтому их образование в кристаллической решетке возможно только лишь в результате высокоэнергетических воздействий, таких как ионная имплантация, импульсное нагружение материала и других. Появление точечного дефекта внедрения вызывает локальное возрастание энергии кристалла. В результате релаксационных процессов точечные дефекты внедрения оказываются генераторами структурно-энергетических превращений, которые могут происходить в материале.

В настоящей работе исследуется атомная конфигурация вблизи точечных дефектов внедрения на примере тонкой пленки интерметаллида типа Ni_3Al , представляющей упаковку атомов в плоскости $\{111\}$ сверхструктуры L_{12} . Исследования структурных и энергетических превращений выполнены с использованием метода молекулярной динамики [1].

Ранее методом молекулярной динамики исследовалась локальная трансформация кристаллической решетки в тонкой пленке Al, происходящая при ионной имплантации атомов Al [2]. Было показано, что в результате структурно-энергетических превращений вблизи пар точечных дефектов внедрения могут образоваться дислокационные диполи и дислокационные петли, а также возникать поля смещений атомов, соответствующие образованию краудионов [3-5].

Методика расчета

Тонкая пленка представляет собой одну атомную плоскость $\{111\}$ сверхструктуры L_{12} . Компоненты сплава находятся в узлах гексагональной кристаллической решетки. В структуру тонкой пленки вводится дефект при начальной температуре соответствующей $T=0K$. Затем производится разогрев до сравнительно невысоких температур, для

включения релаксационных процессов по методу молекулярной динамики. При этом скорости движения атомов, оказываются связанными с температурой согласно распределению Больцмана. Разогрев включается до таких температур, чтобы точечные дефекты могли перемещаться по кристаллу. После стабилизации определенного состояния кристалла по энергии включается процедура искусственной диссипации энергии для охлаждения кристалла до $T=0K$.

Для описания сил атомного взаимодействия используется парный потенциал Морза; D , β , α – параметры потенциала взяты из [6]:

$$\varphi(r) = D \cdot \beta \cdot e^{-\alpha r} (\beta \cdot e^{-\alpha r} - 2), \quad (1)$$

где r – расстояния между парой атомов. Радиус взаимодействия простирается до 8 координационных сфер. Расчетный блок содержит (32×32) атомов, на границы блока накладываются периодические условия.

Потенциальная энергия системы представлена в виде суммы энергий парных взаимодействий всех атомов:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \neq j \\ i, j=1}}^N \varphi_{ij}(|r_i - r_j|), \quad (2)$$

где r_i – радиус-вектор i -го атома,

$\varphi_{ij}(r)$ – парный потенциал Морза.

Энергия релаксации E_r равна разности энергии системы E_n в начальной конфигурации (соответствует энергии в модели жестких сфер) и энергии системы E_k в конечной конфигурации с учетом релаксации (когда атомы находятся в устойчивом состоянии и лишь колеблются возле него):

$$E_r = E_k - E_n. \quad (3)$$

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ ВНЕДРЕНИЯ В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ СОСТАВА A_3B

Энергетические характеристики точечных дефектов внедрения можно рассчитать двумя методами в зависимости от способа их создания. В первом методе расчета предполагается, что атом не обладает достаточной энергией, чтобы оторваться от поверхности, но может мигрировать во внутрь кристалла. Тогда изменение энергии при образовании межузельного атома E^1 равно разности энергии кристалла с межузельным атомом и идеального кристалла за вычетом половины энергии «разорванных связей», образовавшихся на поверхности кристалла:

$$E_s^1 = E_n - E_i - \frac{E^A}{2},$$

$$E_{dm}^1 = E_k - E_i - \frac{E^A}{2}. \quad (4)$$

Здесь E_s^1 – энергия образования дефекта кристалла в модели жестких сфер, E_{dm}^1 – энергия образования дефекта с учетом динамической релаксации, E_i – энергия идеального кристалла, E_A – энергия «разорванных межатомных связей», вблизи вакантного узла, законного для атома А.

Во втором методе расчета изменения энергии предполагается, что атом мигрировал в межузельное положение, образовав вакансию, и эти два точечных дефекта находятся на относительно большом расстоянии, так что их энергия взаимодействия мала. Тогда изменение энергии системы E^2 равно сумме энергии идеального кристалла, энергии образования вакансии и энергии образования межузельного атома:

$$E_s^2 = E_i + E_s^v + E_s^m,$$

$$E_{dm}^2 = E_i + E_{dm}^v + E_{dm}^m, \quad (5)$$

где E_s^v – энергия образования вакансии в модели жестких сфер, E_{dm}^v – энергия образования вакансий с учетом релаксации, E_s^m – энергия образования межузельного атома в модели жестких сфер,

E_{dm}^m – энергия образования межузельного атома с учетом релаксации.

Распределение атомов вблизи внедренного атома характеризуется параметром $r_{см}$ – относительным смещением атомов от узлов кристаллической решетки, которое определяется, как отношение Δr (величина смещения) к межатомному расстоянию в идеальном кристалле атомной в плоскости (111) в процентах:

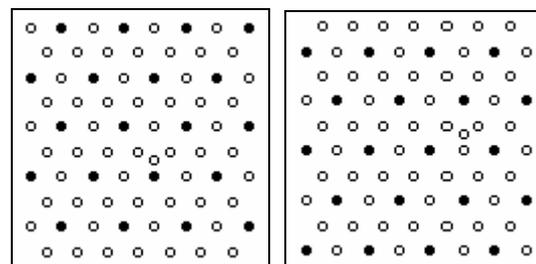
$$r_{см} = \frac{|\Delta r|}{a} \cdot 100\% \quad (6)$$

$a = \frac{a_0}{\sqrt{2}}$ – расстояние между атомами в плотноупакованной атомной плоскости (111), (a_0 - параметр кристаллической решетки).

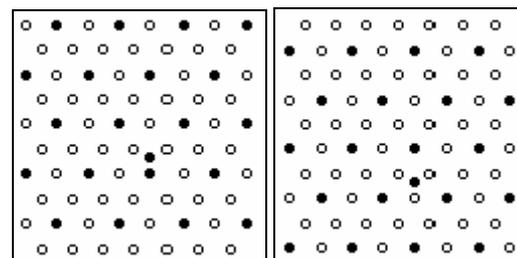
Для визуализации величины и направления смещений построены трехмерные профили поверхностей смещений, а также схематическое изображение смещений вблизи дефектов с указанием смещений в виде стрелок, в соответствующем масштабе.

Результаты и обсуждение

В тонкой пленке интерметаллида типа Ni_3Al возможные варианты конфигураций точечных дефектов приведены на рис. 1. В конфигурациях 1 и 2 внедрен атом Ni, однако, в 1 конфигурации внедренный атом окружен одним атомом Al и двумя атомами Ni, в 2



1-я конфигурация 2-я конфигурация



3-я конфигурация 4-я конфигурация

Рис. 1. Конфигурации размещений атомов Ni и Al в межузельном положении.

* Атомы Ni обозначены белым цветом; атомы Al – черным цветом.

конфигурации внедренный атом Ni окружен тремя атомами Ni. В конфигурациях 3 и 4 внедрен атом Al, окруженный аналогично внедренному атому Ni в 1 и 2 конфигурациях.

Распределения смещений атомов вблизи точечных дефектов внедрения, полученные в результате динамической релаксации, представлены на рис. 2. Как видно из рисунков, картины смещений атомов вблизи внедренного атома Ni в двух конфигурациях отличаются незначительно. Аналогично, близкие картины смещений атомов наблюдаются вблизи внедренного атома Al. Смещения атомов вблизи точечных дефектов внедрения характеризуются определенной радиальной симметрией. Смещения атомов вблизи внедренного атома Al незначительно отличаются от смещений атомов вблизи точечного дефекта внедрения атома Ni.

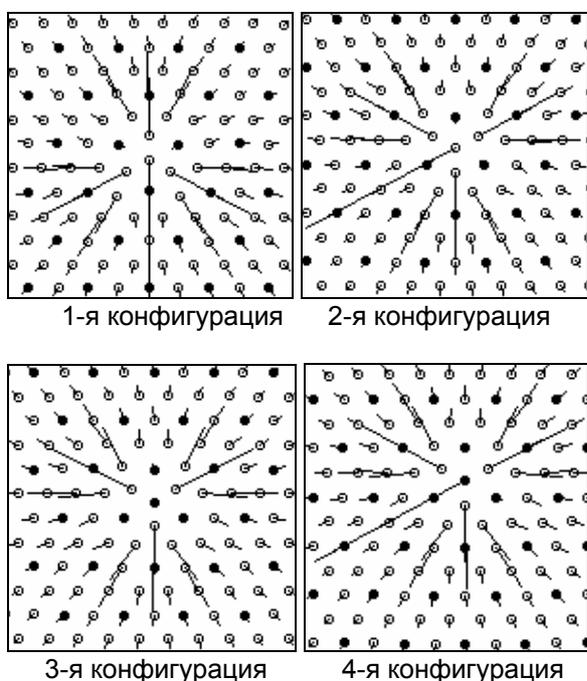


Рис. 2. Схематические изображения смещений атомов вблизи межузельных атомов в упорядоченном сплаве с учетом релаксации для заданных конфигураций.

Масштаб смещений в долях к межатомному расстоянию составляет (1:10).

В результате релаксации вблизи точечного дефекта внедрения возникает локальная область с элементом точечной симметрии пятого некристаллического порядка, состоящая из трех пятиугольников, состыкованных точечным дефектом внедрения (рис. 3).

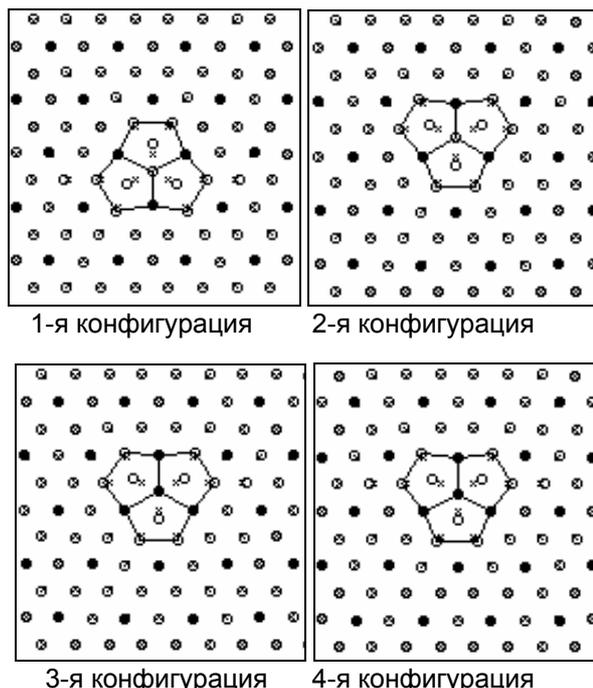


Рис. 3. Конфигурации вблизи межузельных атомов, полученные с учетом атомной релаксации. Линиями выделены области локального нарушения симметрии решетки, где смещения атомов из узлов превышают 22% от межатомного расстояния.

Расчет энергий образования дефекта в динамике для заданных конфигураций (рис. 1) представлен в табл.1. Изменения энергии кристалла, рассчитанные по первому и второму методу, близки по значению.

Таблица 1. Энергетические характеристики

Конфигурации	E_{dm} - энергия образования межузельного атома в динамической системе (эВ)	
	E_{dm}^1	E_{dm}^2
1	2,21	2,20
2	2,21	2,20

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ ВНЕДРЕНИЯ В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ СОСТАВА A_3B

3	2,61	2,61
4	2,61	2,58

где E^1, E^2 – методы расчета энергий в соответствии с формулами (4),(5).

Площадь плотности относительных смещений атомов вблизи точечных дефектов внедрения можно наблюдать на двумерном профиле поверхности смещений в проекции вида сверху (рис.4). В конфигурациях 1, 2 и 4 наблюдается два четко выраженных кластера смещений атомов вблизи точечного дефекта внедрения, имеющих вытянутую форму и расположенных под углом 120° друг к другу. В 3 конфигурации два атома Al находились на достаточно близком расстоянии друг от друга, что привело к миграции межузельных атомов через соседний атомный ряд и образованию одного кластера смещенных атомов вблизи точечного дефекта внедрения.

Трехмерный профиль поверхности относительных смещений атомов вблизи точечного дефекта внедрения представлен на рис. 5. В 1, 2, 4 конфигурациях наблюдается три острых пика смещений атомов, в 3 – конфигурации – только один пик.

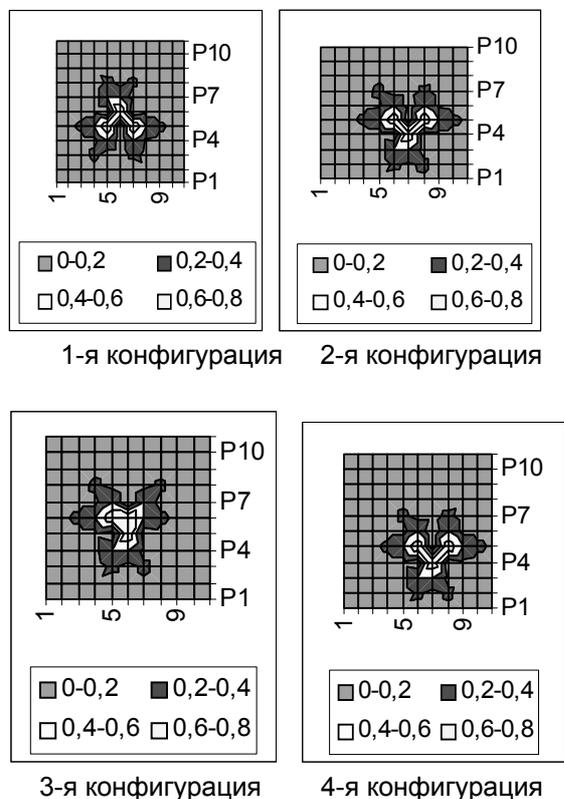


Рис. 4. Двумерные профили смещений атомов вблизи точечного дефекта внедрения. Распределение цвета соответствует определенному проценту относительного смещения атома.

Таким образом, смещения атомов во всех заданных конфигурациях имеют радиально симметричный характер с центром соответствующим положению точечного дефекта внедрения.

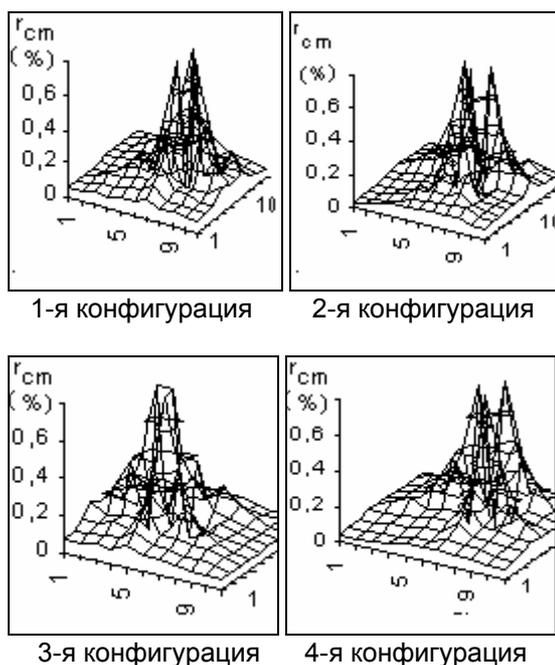


Рис. 5. Трехмерные профили поверхности смещений атомов вблизи точечного дефекта внедрения.

Заключения

Рассчитаны значения энергий образования точечных дефектов внедрения в сверхструктуре $L1_2$ тонкой пленки интерметаллида типа Ni_3Al . Показано, что минимальными по энергии образования являются конфигурации точечных дефектов внедрения в положениях 1 и 2 конфигурации, когда внедренным атомом является атом Ni.

Получены профили локальных смещений соседей вблизи точечных дефектов внедрения. Показано, что точечные дефекты внедрения создают в двумерной решетке кристалла локальные области некристаллического состояния с элементами симметрии третьего и пятого локального порядка. Подобные области должны

оказывать определенное влияние на физические и физико-механические свойства исследуемых материалов.

Работа выполнена в соответствии с грантом № 02-02-17875 (РФФИ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике /Пер. с англ. – М.: Наука, 1990. – 176 с.
2. Старостенков М.Д., Полетаев Г.М., Старостенков Д.М. Модель образования дислокаций и дислокационных петель вблизи внедренных атомов в двумерной тонкой пленке Al // V Межд. школа-семинар по эволюции дефектных структур в конденсированных средах: Тезисы. - Барнаул, 2000. - С.127-128.
3. Starostenkov M.D., Poletayev G.M., Starostenkov D.M. Transformation of interstitial point defects after ion beam implantation in dislocation loops// Book of Abstracts XIIIth Inter. Conf. On Ion Implantation Technology (IIT 2000), September 17-22, 2000. Alpbach, Austria, p.96.
4. Starostenkov M.D., Poletayev G.M., Starostenkov D.M. The mechanism of reconstruction of interstitial pairs of atoms into dislocation dipoles, dislocation loops in 2D lattice of Al// Book of Abstracts Inter. Conf. "Mass and Charge Transport in Inorganic Materials", Venice, May 28 – June 2, 2000, p.23.
5. Starostenkov M.D., Poletayev G.M., Starostenkov D.M. Transformation of implantation induced interstitial point defects in dislocation loops// Proceeding of XIIIth Inter. Conf. On Ion Implantation Technology (IIT 2000), 2001, Austria, p.123-126.
6. Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B . Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.наук. Томск. ТГУ, 1987.