

9 Alontseva D.L., Ivanov S.A., Pogrebniak A.D., Russakova A.V., Prokhorenkova N.V. *Structural-phase state and structure model of Ni-Cr and Co-Cr based powder coatings deposited by plasma detonation on a steel substrate* // Deformation and fracture of materials, 2012, No. 8, p. 14–20.

10 Alontseva D.L., Krasavin A.L., Pogrebniak A.D., Rakhmetullina S.Z., Russakova A.V. *Modification of a structure-phase composition and properties of plasma detonation coatings by e-beam irradiation* // Journal of Advanced Materials, 2013, No. 1, p. 5–12.

11 Alontseva D.L., Krasavin A.L. *Computer Simulation of Temperature Profiles of a Two-Layer Sample During Heating by the Electron Beam* // The Kazakh-American Free University Academic Journal, J 38, USA, Oregon, 2013, p. 252–257.

УДК 538.911

И.А.Дёмина<sup>1</sup>, Г.В.Попова<sup>1</sup>, М.Д.Старостенков<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Восточно-Казахстанский государственный университет им. С.Аманжолова, Усть-Каменогорск;

<sup>2</sup>Алтайский государственный технический университет им. И.И.Ползунова,  
Барнаул, Россия (E-mail: irdyomina@mail.ru)

### Влияние комплексов точечных дефектов на процесс разупорядочения сплава $\text{Cu}_3\text{Au}$

Статья посвящена исследованию методом молекулярной динамики вклада комплексов точечных дефектов в процесс разупорядочения сплава  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , а также изучению стадий образования комплексов, состоящих из двух вакансий, в зависимости от расстояния между ними, предельной температуры их существования и влияния давления всестороннего сжатия и растяжения на температурные области их устойчивости. Выявлены температурные интервалы образования комплексов и их существование. Показано, что температура распада комплексов зависит от их состава.

*Ключевые слова:* компьютерное моделирование, комплексы точечных дефектов, вакансии, дивакансионные комплексы, межузельные атомы, процесс разупорядочения, давление всестороннего сжатия, давление всестороннего растяжения.

Известно, что к точечным дефектам относятся различные ассоциации или комплексы точечных дефектов [1–3]. Число возможных комплексов очень велико, а вероятность их образования тем больше, чем больше концентрация простых дефектов и чем больше вероятность их встреч. Образовавшиеся комплексы в большинстве случаев обладают свойствами, отличными от свойств образующих их простых дефектов. При высоких температурах, когда равновесная концентрация достаточно велика, одиночные вакансии могут образовывать вакансионные комплексы типа ди-, тривакансии в зависимости от энергии их связи. Ранее особенности процесса разупорядочения сплава  $\text{Cu}_3\text{Au}$  в зависимости от концентрации вакансий и температуры были рассмотрены в работе [4]. В настоящей работе методом молекулярной динамики изучены стадии образования комплексов, состоящих из двух вакансий, в зависимости от расстояния между ними, предельной температуры их существования и их вклад в процесс разупорядочения сплава  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , в зависимости от температуры, и влияние давления всестороннего сжатия и растяжения на температурные области их устойчивости.

В качестве объекта исследования был взят двумерный кристалл сплава  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , соответствующий упаковке атомов плоскости  $\{111\}$  ГЦК-решётки сверхструктуры  $L1_2$ . Расчетный блок кристалла представлялся содержащим 1600 атомов, за пределами блока структура повторялась с помощью периодических граничных условий. Кристалл импульсно разогревался от 0 К до определенной температуры, выдерживался при этой температуре в течение 50 пс компьютерного времени, а затем охлаждался. Всего конфигураций в интервале расстояний между парами вакансий до пятого соседства десять. На более далёких расстояниях эффекты взаимодействия между парами вакансий оказываются незначительными и поэтому не рассматриваются. Эксперименты проводились с использованием программы [5].

В результате исследований было установлено, что для двумерного кристалла упорядоченного сплава  $\text{Cu}_3\text{Au}$  объединение пары вакансий в комплекс и его трансформация в тривакансию и межузельный атом происходит в интервалах температур от 10 до 300К в зависимости от расстояния между

парами вакансий. В таблице 1 приведено изменение температуры активации процесса объединения двух одиночных вакансий в дивакансионный комплекс.

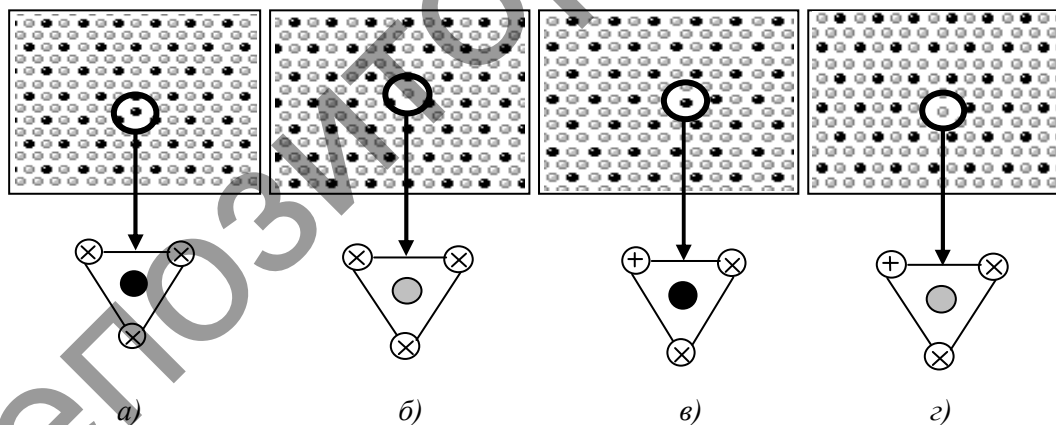
Т а б л и ц а 1

**Изменение температуры активации процесса объединения двух одиночных вакансий в дивакансионный комплекс**

	Координационная сфера	T, К
Au-Cu	1	200
	2	100
	4	350
	5	300
	1	50
Cu-Cu	2	100
	3	10
	4	300
	5	350
	Au-Au	3

Как видно из таблицы 1, температуры, при которых происходит образование комплекса, зависят от типа узлов, в которые помещаются вакансии. Одним из факторов, объясняющих, что в третьем соседстве пары вакансий Cu-Cu обнаруживается относительный минимум энергии образования комплекса по температуре (10К), может служить свободный объём. В случае дивакансии в ближайшем соседстве свободный объём составляет  $\frac{5a^2\sqrt{3}}{2}$ , тогда как в третьем соседстве —  $3a^2\sqrt{3}$ .

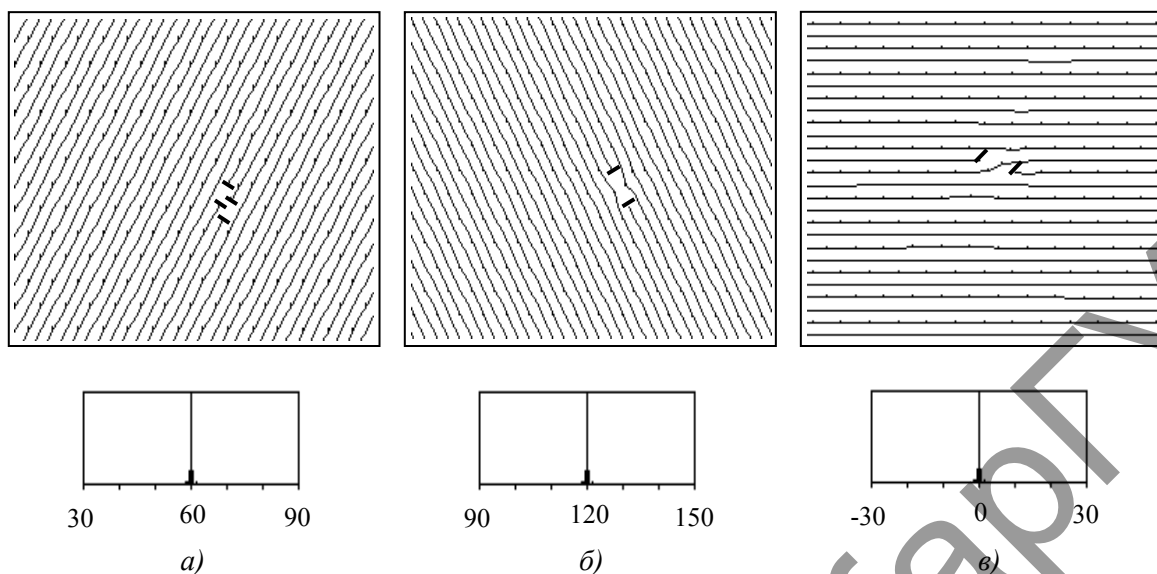
В работе [6] показано, что пары близкорасположенных вакансий могут объединяться в дивакансии, которые трансформируются в комплекс, состоящий из межузельного атома и трёх близкорасположенных вакансий. В плоскости {111} сверхструктуры L1<sub>2</sub> можно выделить четыре типа тривакансий, центрируемых межузельным атомом. Примеры стартовых конфигураций комплексов приведены на рисунке 1.



а) комплекс, состоящий из трех вакансий в узлах Cu и внедренного атома Au; б) комплекс, состоящий из трех вакансий в узлах Cu и внедренного атома Cu; в) комплекс, состоящий из одной вакансии в узле Au, двух вакансий в узлах Cu и внедренного атома Au; г) комплекс, состоящий из одной вакансии в узле Au, двух вакансий в узлах Cu и внедренного атома Cu: ● — атом Cu; ● — атом Au; ⊗ — вакансия в узле решётки Cu; ⊕ — вакансия в узле решётки Au

Рисунок 1. Стартовые конфигурации комплексов

Характеристикой образования последнего комплекса является визуализатор, показывающий распределение плотноупакованных рядов. Картина атомных рядов включает три диапазона (относительно оси x):  $-30^{\circ}-30^{\circ}$ ;  $30^{\circ}-90^{\circ}$ ;  $90^{\circ}-150^{\circ}$ . На рисунке 2 показано распределение атомных рядов в случае одиночных вакансий, их объединение в дивакансию и образование комплекса.



а) двойная дислокационная петля; б) дислокационная петля; в) дислокационный диполь

Рисунок 2. Картина распределения атомных рядов вблизи комплекса, состоящего из трех вакансий и межузельного атома

Как видно из рисунка 2, вблизи комплекса, состоящего из межузельного атома и трех вакансий, наблюдается деформация рядов по сравнению с их идеальным кристаллогеометрическим распределением. Последнее обстоятельство демонстрирует график радиального распределения атомов по координационным сферам, как показано на рисунке 3. При образовании комплекса линии распределения атомов по координационным сферам размываются.

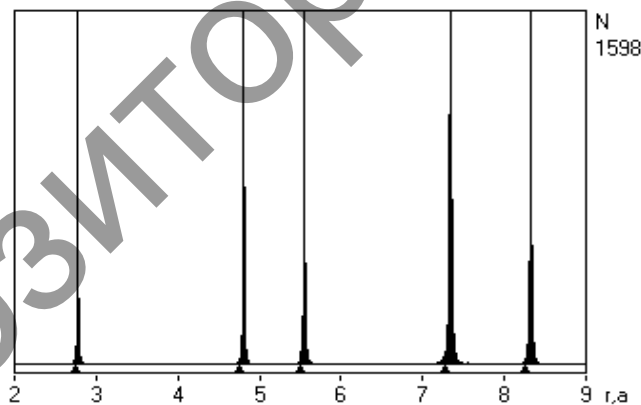


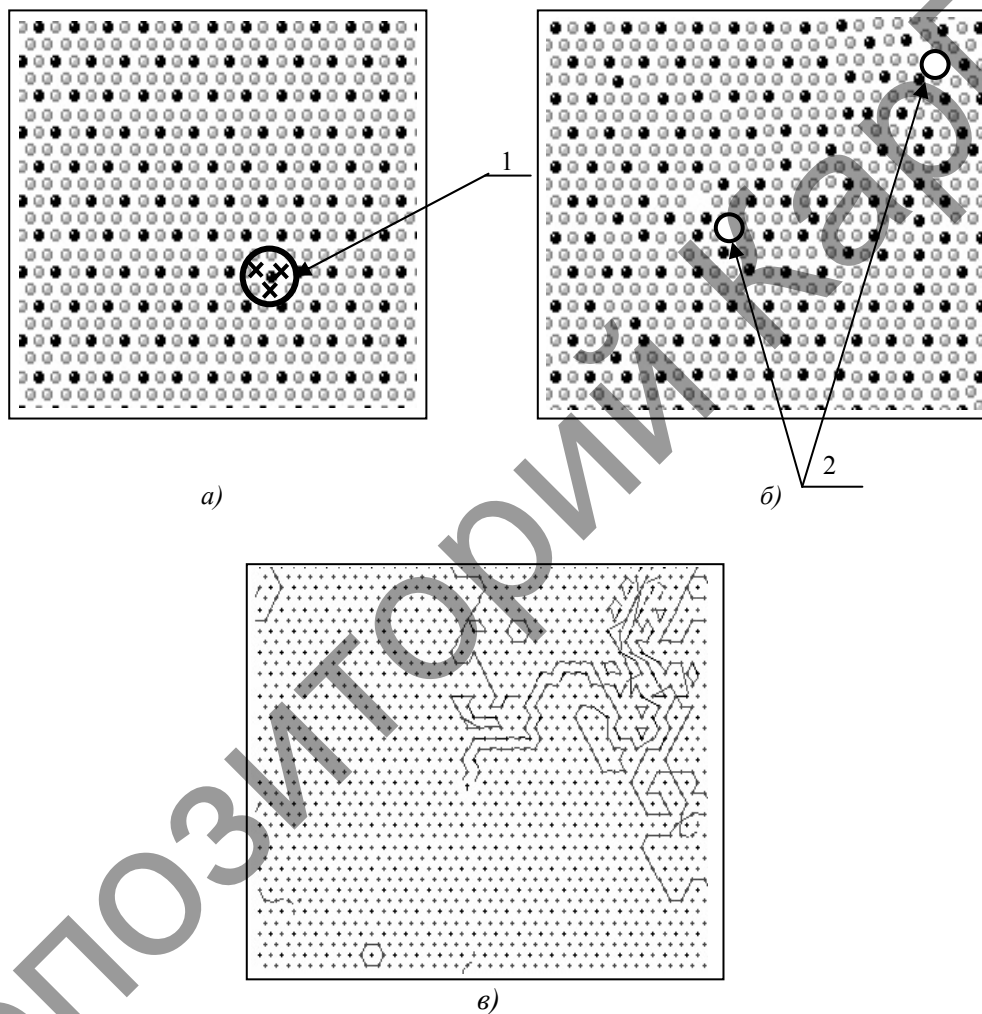
Рисунок 3. Диаграмма радиального распределения атомов по координационным сферам

Компьютерный эксперимент показал, что комплексы, состоящие из вакансии в узле Au, двух вакансий в узлах Cu и внедрённого атома Au, сохраняются вплоть до температуры 850K. В процессе перемещения комплекса создаются обширные области разупорядочения, большие, по сравнению с одиночной вакансией и наличием точечного дефекта замещения. При наличии одной вакансии доля разупорядоченной фазы составила 5,82%, тогда как при наличии комплекса доля разупорядочённой фазы увеличилась до 8,39%. Более быстро разрушаются комплексы, состоящие из вакансий в узлах Cu и внедрённого атома Cu.

Как показали результаты исследования, температура стабильности стартового комплекса, состоящего из одной вакансии в узле Au, двух вакансий в узлах Cu и внедрённого атома Au при деформации всестороннего сжатия, соответствующей 2,6 %, повышается до 1450K. При 1500K комплекс распадается, образуется пара одиночных вакансий, которая вносит в процесс разупорядочения неза-

висимые вклады, как показано на рисунке 4. Следует отметить, что при такой температуре вновь возникает целая система конкурирующих механизмов диффузии, включающих кольцевой механизм перемещения атомов, краудинный и механизм расщепления комплексов вакансий, создаваемых за счёт термоактивируемых коллективных смещений атомов. При введении деформации всестороннего растяжения 1,03% температура стабильности комплекса, состоящего из одной вакансии в узле Au, двух вакансий в узлах Cu и внедренного атома Au, снижается до 10 К, по-видимому, при данном виде деформации подобный комплекс не должен существовать.

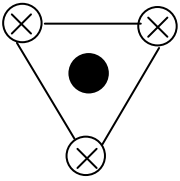
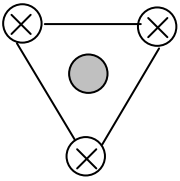
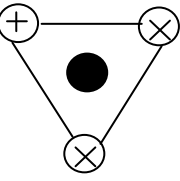
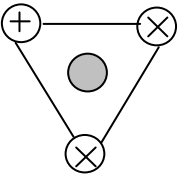
При деформации всестороннего сжатия комплексы сохраняются вплоть до температуры, превышающей  $T_{пл.}$ , при деформации всестороннего растяжения комплексы разрушаются при более низких температурах. В таблице 2 приведена температура распада комплексов.



- а) начальная конфигурация расчетной ячейки; 1 — комплекс, состоящий из одной вакансии в узле Au, двух вакансий в узлах Cu и внедренного атома Au; X — положения, соответствующие вакансиям;  
 б) конечная конфигурация расчетной ячейки; 2 — две одиночные вакансии;  
 в) картина траектории атомных перемещений после разогрева

Рисунок 4. Фрагмент расчетной ячейки при 1500 К

Температура распада комплексов

Конфигурации комплексов	Параметр решётки, нм	Относительное изменение параметра решётки $\Delta a/a$ , %	Температура распада комплекса, К	Доля разупорядоченной фазы, %
	0,375	-2,6	Комплекс сохраняется, вплоть до температуры, превышающей $T_{пл}$ .	-
	0,389	0	800	8,76
	0,401	1,03	100	5,76
	0,375	-2,6	Комплекс сохраняется, вплоть до температуры, превышающей $T_{пл}$ .	-
	0,389	0	750	8,08
	0,401	1,03	100	5,63
	0,375	-2,6	1450	18,46
	0,389	0	900	9,27
	0,401	1,03	10	5,57
	0,375	-2,6	Комплекс сохраняется, вплоть до температуры, превышающей $T_{пл}$ .	-
	0,389	0	900	8,64
	0,401	1,03	10	5,63

Примечание. ○ — атом Cu; ● — атом Au; ⊗ — вакансия в узле решётки Cu; ⊕ — вакансия в узле решётки Au.

Как видно из таблицы 2, при  $\Delta a/a = -2,6\%$  комплексы остаются стабильными, при  $\Delta a/a = 0\%$  температура распада комплексов находится в интервале температур 750–900 К, при  $\Delta a/a = 1,03\%$  комплексы распадаются при более низких температурах 10 и 100К. По-видимому, это связано с наличием свободного объёма в расчётной ячейке. При деформации всестороннего сжатия происходит уменьшение свободного объёма в кристалле, в результате чего уменьшается подвижность атомов, и комплексы остаются стабильными.

Таким образом, из полученных результатов видно, что комплексы из трёх близкорасположенных вакансий и межузельного атома в сплаве  $\text{Cu}_3\text{Au}$  вносят вклад в термоактивируемый диффузионный процесс в интервалах температур их существования от 10 до 900К. В температурных интервалах стабильности данный комплекс, по сравнению с другими точечными дефектами, такими как вакансия или точечный дефект замещения, вносит наибольший вклад в процесс разупорядочения сплава  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , вследствие его высокой подвижности. Для их образования необходимо наличие пар близкорасположенных вакансий, в интервале соседства от первого до пятого. Причём температура их образования растёт с увеличением расстояния между парами вакансий. Очевидно, что при этом уменьшаются температурные интервалы существования таких комплексов.

## Список литературы

- 1 Ермаков С.С. Физика металлов и дефекты кристаллического строения. — Л.: Изд. Ленингр. ун-та, 1989. — 280 с.
- 2 Структурно-фазовые состояния и свойства металлических систем / Под общ. ред. А.И.Потекаева. — Томск: Изд. НТЛ, 2004. — 356 с.
- 3 Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. I. Дефекты решётки: Учебник для вузов. — М.: МИСИС, 1999. — 384 с.
- 4 Дудник Е.А., Дудник В.Г., Дёмина И.А., Скаков М.К., Старостенков М.Д. Исследование стадий разупорядочения в двумерном кристалле сверхструктуры  $L1_2$  в зависимости от концентрации вакансий. Сравнительный анализ сплавов  $Cu_3Au$  и  $Ni_3Al$  // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — Барнаул. — 2004. — № 1. — С. 183–188.
- 5 Поletaев 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 г.
- 6 Старостенков М.Д., Дудник Е.А. Классификация точечных дефектов и их комплексов в случае двумерной гексагональной кристаллической решетки. Ч. I. Статистическая модель структуры и энергии образования точечных дефектов и их комплексов // Препринт. — Барнаул: Изд. АлГТУ, 2002. — 40 с.

И.А.Дёмина, Г.В.Попова, М.Д.Старостенков

### **$Cu_3Au$ құймасын реттеу үрдісіне нүктелік ақаулар кешенінің әсері**

Мақала молекулярлық динамика әдісімен  $Cu_3Au$  құймасын реттеу үрдісіне нүктелік ақаулар кешені үлесін, сонымен қатар олардың арасындағы ара қашықтығына, олардың тіршілігінің шекті температурасына және жан-жақты тығыздау қысымының әсері мен олардың төзімділігінің температуралық аймақтардың тартылыстарына созылуына байланысты, екі вакансиядан тұратын кешендер түзілуінің сатыларын оқып-үйренуді зерттеуге арналған. Кешендердің түзілуінің температуралық аралықтары және олардың тіршілігі табылған. Кешендер температурасы олардың құрамына байланысты екендігі көрсетілген.

I.A.Dyomina, G.V.Popova, M.D.Starostenkov

### **Effect of complexes of point defects in the process of disordering of the alloy $Cu_3Au$**

The present work is devoted to the study of molecular dynamics contribution complexes of point defects in the process of disordering of the alloy  $Cu_3Au$ , as well as the study of the stages of formation of complexes consisting of two positions depending on the distance between them, the temperature limit of their existence and effect of pressure hydrostatic compression and tension on the temperature of their sustainability. Detected temperature ranges of formation of the complexes and their existence. It is shown that the temperature of decomposition of complexes depends on their composition.

## References

- 1 Ermakov S.S. *Fizika metals and defects in the crystal structure*, Leningrad: Publ. Leningrad State University, 1989, 280 p.
- 2 *Structural and phase states and properties of metallic systems* / Ed. A.I.Potekaeva, Tomsk: Publ. NTL, 2004, 356 p.
- 3 Shtremel M.A. *Durability of alloys*. A part I. Defects of a lattice: the Textbook for high schools, Moscow: MISIS, 1999, p. 384.
- 4 Dudnic E.A., Dudnic V.G., Dyomina I.A., Skakov M.K., Starostenkov M.D. *The research stages of disorder in the two-dimensional crystal superstructure  $L1_2$  depending on the concentration of vacancies*. Comparative analysis of the alloy  $Cu_3Au$  and  $Ni_3Al$  // The fundamental problems of modern materials, Barnaul, 2004, No. 1, p. 183–188.
- 5 Poletaev G.M. *Molecular dynamics simulations of structural and energy transformations in two-dimensional metals and alloys (MD2)*. Certificate of state registration of the computer number 2008610486 from 25.01.2008.
- 6 Starostenkov M.D., Dudnic E.A. *Classification of point defects and their complexes in the case of a two-dimensional hexagonal lattice*. Part I. The statistical model of the structure and the energy of formation of point defects and their complexes // Preprint. Barnaul: AIGTU Publ., 2002, 40 p.