

М.Д.Старостенков¹, А.В.Маркедонов², А.А.Барчук³, И.А.Дёмина⁴, Г.В.Попова⁴

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

²Филиал Кузбасского государственного технического университета, Новокузнецк, Россия;

³Кузбасская государственная педагогическая академия, Новокузнецк, Россия;

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

Динамика краудионных комплексов в деформированном кристалле

Настоящая работа посвящена изучению динамики краудионов и их комплексов в ГЦК-кристалле, подвергнутому упругому деформированию методом молекулярной динамики. В работе показано, что в наибольшей степени на динамику как отдельных краудионов, так и их комплексов, оказывает влияние деформация решётки именно вдоль направления их движения. Деформации же по другим направлениям оказывают гораздо меньшее значение на фокусировку атомных столкновений при движении краудионов. При сверхскоростном режиме движения влияние упругой деформации решётки фактически исчезает. При этом скорость краудионов стремится к некоторому своему предельному значению.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, упругая деформация, смещение атомов, кристаллическая решетка, кристалл, точечные дефекты.

Точечные дефекты играют важнейшую роль в структурно-энергетических изменениях, происходящих в материалах при внешних высокоэнергетических воздействиях. К простейшим точечным дефектам относятся вакансии и межузельные атомы. Данные дефекты могут возникать в кристаллической решётке в результате внешнего высокоинтенсивного воздействия, например, при ионной имплантации.

При образовании вакансий и межузельных атомов структура кристаллической решётки вблизи них искажается за счёт смещений атомов в упругих полях дефектов, что вызывает локальное нарушение плотности. В процессе структурной релаксации большая часть точечных дефектов аннигилирует, и при этом «идеальная» плотность кристалла восстанавливается. Актуальность данной темы исследования обусловлена тем, что большинство современных конструктивных узлов эксплуатируется в условиях значительных силовых нагрузок.

В настоящей работе изучается динамика краудионов и их комплексов в ГЦК кристалле, подвергнутому упругому деформированию. Кристаллическая решётка Ni-Al моделировалась методом молекулярной динамики, атомы которой взаимодействовали посредством потенциала Морзе. Эксперименты проводились с использованием программы [1]. Способ создания начальной конфигурации расчётной ячейки, как предложено в [2], включал три стадии: построение, первичную релаксацию и охлаждение.

Граница в биметалле Ni-Al проходила через середину ячейки, содержащей 3200 частиц (40×80 частиц). Ячейка представляла собой плоскость {111}. Выбор данной плоскости для исследования обусловлен тем, что диффузионные процессы, как правило, развиваются в плотноупакованных направлениях, которым соответствуют плоскости {111} в обычном ГЦК кристалле [2]. Граничные условия для расчётной ячейки задавались следующим образом: по оси x — периодические, по оси y — свободные. Начальная температура ячеек задавалась равной 0 К.

Рассмотрим одиночный краудион, представляющий собой локализованную область деформации, вызванной введением в плотноупакованном направлении дополнительного межузельного атома. Прежде чем приступить к эксперименту, введём систему координат. Пусть ось Ox совпадает с кристаллографическим направлением $\langle 110 \rangle$, вдоль которого смещается краудион. Тогда оси Oy и Oz совпадают с направлениями $\langle 112 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ соответственно.

Ранее уже отмечалось [3–5], что после того, как скорость смещающегося краудиона уменьшится настолько, что его кинетической энергии будет недостаточно для преодоления потенциальных барьеров, происходит трансформация краудиона в гантельную конфигурацию межузельного атома. Поэтому во избежание подобных ситуаций будем фиксировать время прохождения краудионом некоторого расстояния, равного, например, двенадцати межатомным расстояниям, и определим, как повлияет на его скорость деформация кристалла. Исследования проводились со случая, когда краудиону присваивается начальная скорость, по величине совпадающая со скоростью продольных звуковых волн в алюминии (см. рис. 1).

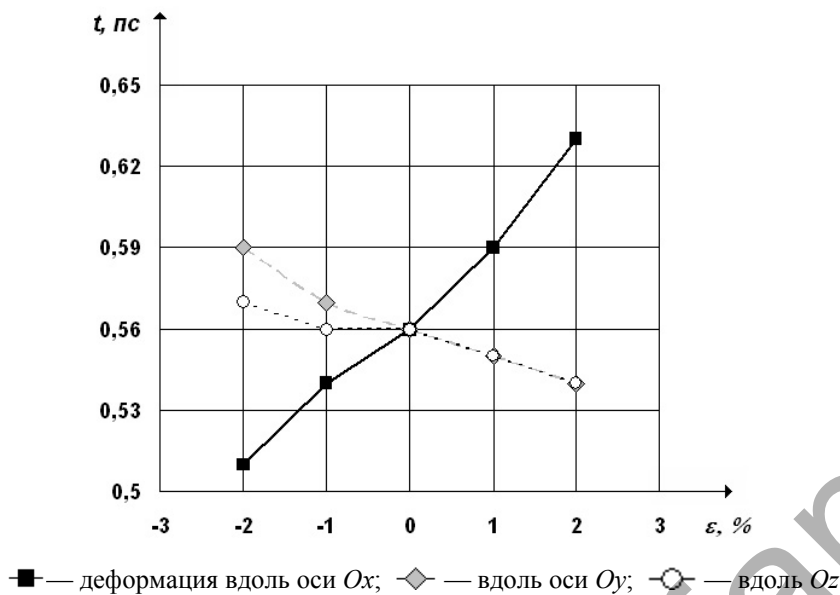


Рисунок 1. Зависимость времени прохождения краудионом заданного расстояния от величины одноосной деформации кристалла

Кристалл в компьютерных экспериментах деформируется в пределах упругой деформации. Как видно из рисунка 1, деформация вдоль разных направлений оказывает различное влияние на скорость краудиона, при этом в наибольшей степени оказывает влияние деформация вдоль направления его движения. Деформация вдоль оставшихся направлений оказывает влияние в гораздо меньшей степени и влияет за счёт увеличения или уменьшения плотности атомной упаковки.

В работе были рассмотрены другие скоростные режимы. Так, при начальной скорости, в два раза меньшей, чем в первом случае, деформация $\epsilon = 2\%$ вдоль оси Ox приводит к увеличению затрачиваемого на прохождение заданного расстояния времени на 0,11 пс, в то время как в предыдущем эксперименте эта разница составляет 0,07 пс. Ещё одной особенностью данного скоростного режима является наблюдение в отдельных экспериментах расфокусировки атомных столкновений, и, как следствие, образование гантельных конфигураций. В случае если начальная скорость краудиона в два раза больше звуковой скорости, то на рассматриваемом расстоянии заданные деформации кристаллической решетки приводят к увеличению или уменьшению скорости краудиона лишь на 0,01 пс, т.е. в пределах одной итерации компьютерного эксперимента. Таким образом, деформация кристалла приводит к изменению динамики краудионов.

Рассмотрим теперь не одиночные краудионы, а их комплексы. Будем рассматривать комплексы, состоящие из четырех краудионов. Исследование влияния деформации кристаллической решетки на динамику краудионных комплексов проводилось в диапазоне начальных скоростей от 0,4 с до 2 с, где с — скорость продольных звуковых волн в алюминии.

Эксперимент показал, что упругая деформация влияет на динамику комплексов в том же ключе, как было описано выше, при исследовании одиночного краудиона. На рисунках 2 и 3 представлены зависимости времени прохождения плоским и объёмным комплексом соответственно двенадцати межатомных расстояний при деформации кристаллической решетки вдоль направления Ox . Из рисунков видно, что объёмный комплекс, при равных значениях начальной скорости, быстрее преодолевает заданное расстояние. При этом деформация решетки оказывает на него меньшее влияние.

Между смещениями комплексов разных типов существует и другое кардинальное различие. Так, плоский комплекс оказывается более чувствительным к деформации вдоль направления Oz , нежели объёмный. Очевидно, что это связано именно с расположением комплекса в плоскости $\langle 111 \rangle$. Например, увеличение времени, затрачиваемого на преодоление заданного расстояния, при деформации $\epsilon = -2\%$ вдоль направления Oz составляет 0,33 пс, по сравнению с 0,09 пс в случае объёмного комплекса. В то же время скорость плоского комплекса в меньшей степени зависит от деформации вдоль направления Oy , нежели у объёмного. При деформации $\epsilon = -2\%$ увеличение затрачиваемого времени составляет 0,05 и 0,09 пс для плоского и объёмного комплекса соответственно.

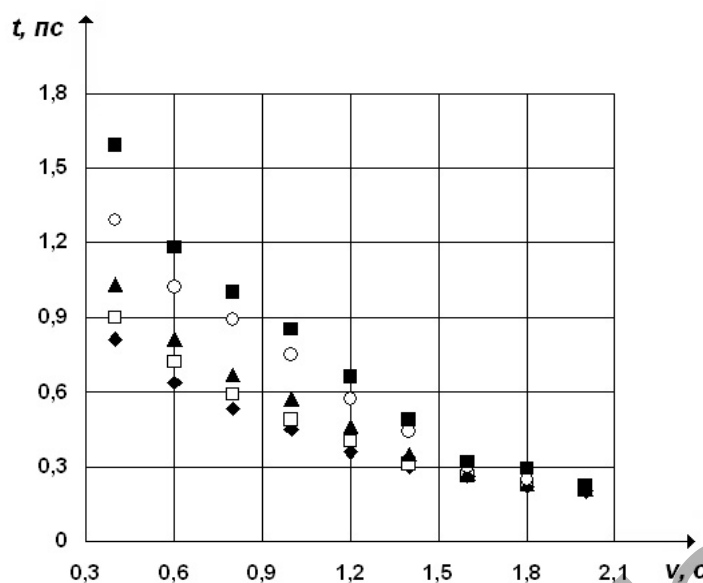


Рисунок 2. Зависимость времени прохождения плоским краудионным комплексом заданного расстояния в зависимости от начальной скорости комплекса при деформации кристаллической решётки, равной -2% (\blacklozenge), -1% (\square), 0% (\blacktriangle), 1% (\circ) и 2% (\blacksquare) вдоль направления Ox

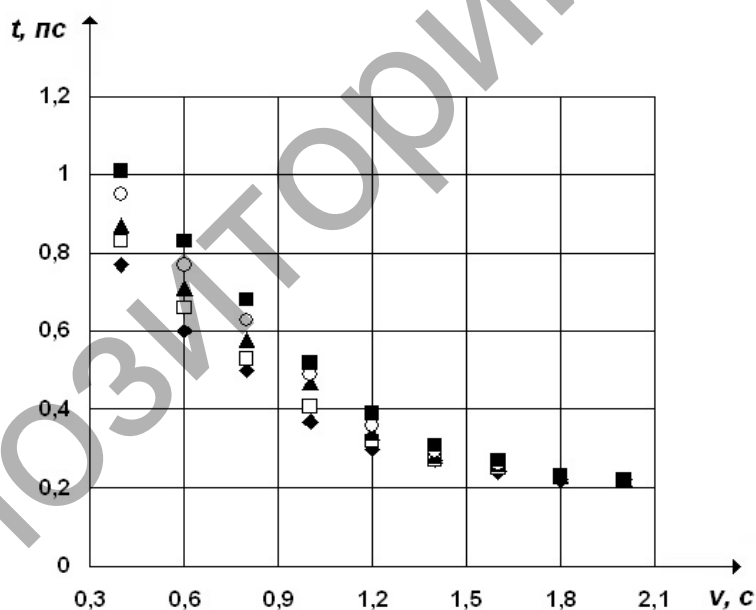


Рисунок 3. Зависимость времени прохождения объёмным краудионным комплексом заданного расстояния в зависимости от начальной скорости комплекса при деформации кристаллической решётки, равной -2% (\blacklozenge), -1% (\square), 0% (\blacktriangle), 1% (\circ) и 2% (\blacksquare) вдоль направления Ox

Общим фактом для деформаций по любым направлениям является снижение их влияния при увеличении начальной скорости краудионных комплексов. Из рисунков 2 и 3 видно, что при начальных скоростях выше скорости звука различие во времени прохождения отрезка заданного пути при различных величинах деформации практически исчезает. Закономерности движения краудионных комплексов можно разбить на две области с дозвуковой и сверхзвуковой скоростью. В работе показано, что при начальных скоростях комплексов выше скорости звука различие между скоростью движения комплексов при различных температурных режимах исчезает.

В качестве дополнительного исследования был проведён эксперимент, при котором плоский краудионный комплекс располагался под углом $\pi/3$ к оси Ox . В данном случае наблюдается уменьшение влияния деформации вдоль направления Ox на скорость краудионов, но при этом увеличивается влияние деформации по оси Oy . Но даже в этом случае при начальной скорости комплекса, в два раза большей скорости звука, различие во времени прохождения заданного расстояния исчезает.

Проведенное исследование показало, что в наибольшей степени на динамику как отдельных краудионов, так и их комплексов оказывает влияние деформация решётки именно вдоль направления их движения. Деформации же по другим направлениям оказывают гораздо меньшее влияние на фокусировку атомных столкновений при движении краудионов. При сверхскоростном режиме движения влияние упругой деформации решётки фактически исчезает. При этом скорость краудионов стремится к некоторому своему предельному значению.

Таким образом, можно сделать вывод, что динамика краудионных комплексов различна при скоростях ниже и выше скорости звука.

References

- 1 Poletaev G.M. Modeling by a method of molecular dynamics of structurally-power transformations in two-dimensional metals and alloys (MD2) / The certificate about State Computer program registration № 2008610486 from 25.01.2008.
- 2 Poletaev G.M. Research of processes of mutual diffusion in two-dimensional system Ni-Al: Dissertation ... candidate of physical and mathematical sciences. — Barnaul, 2002. — P. 186.
- 3 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Mechanism of transformation of crowdion complexes when passing a longitudinal wave // The Nonlinear world. — 2011. — Vol. 9. — № 12. — P. 826–835.
- 4 Markidonov A.V., Starostenkov M. D., Barchuk A.A. Interaction of moving crowdion complexes with dot defects in GTsK a crystal // Fundamental problems of modern materials science. — 2012. — Vol. 9. — № 1. — P. 108–113.
- 5 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Dynamic braking of crowdion complexes // Letters on materials. — 2011. — Vol. 1. Iss. 2. — P. 102–106.
- 6 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. The behavior of crowdions and their complexes in weakly stable states of materials // Russian Physics Journal. — 2012. — Vol. 54. — № 11. — P. 1241–1246.
- 7 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Dissipatsy of energy moving crowdions on low-angular borders of grains of an inclination in aluminum // Fundamental problems of modern materials science. — 2011. — Vol. 8. — № 4. — P. 99–103.
- 8 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Features of dynamics of crowdion and their complexes in deformed GTsK crystal // Fundamental problems of modern materials science. — 2011. — Vol. 8. — № 3. — P. 83–88.
- 9 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Features of dynamics of crowdion in crystals with GTsK lattice at various power influences // Chemical physics and a mezoskopiya. — 2012. — Vol. 14. — № 1. — P. 46–54.

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

Өзгертілген кристалдағы краудиондық кешендердің қозғалысы

Мақала краудиондар және олардың кешендерінің молекулярлық әдісімен иілгіш өзгерулеріне салынған қырлары центрленген тетраэдр кристалындағы қозғалысты зерттеуге арналған. Бөлек краудиондардың, олардың кешендерінің де қозғалысына ең жоғары дәрежеде олардың дәл қозғалу бағыты бойынша тордың өзгеруі әсер етеді. Басқа бағыттағы өзгерістер атомдық соғылыстарының анықталуына әлдеқайда аз мәнде әсер етеді. Жоғары жылдамдықпен жылжу режимінде тордың иілгіш өзгеруі әсері жоғалады. Бұл жағдайда краудиондардың жылдамдығы өзінің шектік мәніне ұмтылады.

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

Dynamics of crowdion complexes in the deformed crystal

The work is devoted to loudspeaker studying of crowdion and their complexes in GTsK crystal, to the subjected elastic deformation by a method of molecular dynamics. In work it is shown that most on dynamics both separate crowdion, and their complexes, lattice deformation exactly along the direction of their movement influences. Deformations in other directions render smaller value is ready for focusing of nuclear collisions at movement of crowdion. At a superfast mode of movement influence of elastic deformation of a lattice actually disappears. Thus speed of crowdion aspires to some limiting value.