

Исследование зависимости скорости массопереноса от расстояния между межузельным атомом и дислокацией несоответствия на модельной границе биметалла Ni-Al

Research of the dependence of mass transfer rate on the distance between the interstitial atoms and misfit dislocations for the modeled border bimetal Ni-Al

Старостенков М.Д.¹, Захаров П.В.², Медведев Н.Н.², Дёмина И.А.³, Попова Г.В.³

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

²Алтайская государственная академия образования им. В.М.Шукишина, Бийск, Россия;

³Восточно-Казахстанский государственный университет им. С.Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан
(E-mail: irdyomina@mail.ru., genphys@mail.ru)

Мақала түйінаралық атомнан Ni-Al биметалының шекарасындағы сәйкессіз орналасуына дейінгі арақашықтыққа масса орын ауыстыру үрдісінің компьютерлік үлгілеу әдісін зерттеуге арналған. Қозғалыс сипатталысы негізінен түйінаралық атомнан металл шекарасына дейінгі арақашықтықпен сипатталады. Түйінаралық атомның енгізілуі атомдар қозғалысының бағыты тығызорамды қатардан металл шекарасымен қиылысқанға дейін және шеткі тізбектен атомның көршілес металдың кристалл торына ығысуымен бағыттас болады. Осылайша, жүйені энергетикалық тиімді күйге әкелетін ерекше дефектілердің аннигиляциясы жүреді, сонымен қатар атомдар қозғалысының тік сызықты және сынық сызықты траекториялары байқалады.

The present work is devoted research by a method of computer modeling of process of carrying over of weights from distance between the atom which is in knot and dispositions of discrepancy on modeling border of bimetal Ni-Al. It is shown that character of displacement irrespective of type of the introduced atom is caused mainly by the distance expressed through number N of interatomic distances of densely packed number between atom, being in knot and metal border. It is established that introduction of the atom which is in knot leads to the directed displacement of atoms along a direction of dense packing before crossing of densely packed number with border of metals and replacement of atom from an extreme number in a crystal lattice of the next metal, thus displacement of atoms occurs towards the nearest disposition of discrepancy. Thus, occurs original defect annihilation to more favourable power condition of system, rectilinear and broken ways of mixture of atoms are observed.

Экспериментально диффузионные процессы исследуются преимущественно на макроскопическом уровне. При этом могут быть выявлены в основном макроскопические характеристики диффузии (коэффициент диффузии), тогда как диффузионные процессы протекают на микроскопическом, атомном уровне. Такие особенности достаточно сложно исследовать традиционными методами экспериментальной физики. Решению подобной проблемы может помочь применение методов компьютерного моделирования, позволяющих достаточно надёжно, при значительно меньших затратах времени и средств смоделировать протекание процесса. Получаемые при этом сведения, в свою очередь, позволяют определить набор характерных свойств дефектов, которые могут быть выявлены в процессе экспериментального наблюдения структуры материала. В ряде исследований рассматривается процесс массопереноса при наличии точечных дефектов: межузельных атомов и вакансий [1–4]. Кроме того, процессы, связанные с массопереносом, возникают при наличии ряда других дефектов: междоузлий, дефектов замещения и внедрения, дислокаций, дефектов упаковки, границ зёрен и фаз [5].

В настоящей работе делается попытка выявления зависимости скорости массопереноса от расстояния между дефектами. В качестве дефектов рассматривается межузельный атом (МА) и дислокация несоответствия (ДН) на границе биметалла Ni-Al. Формирование границы металлов с дислокациями несоответствия обусловлено различием в значении постоянных решётки Ni и Al [6, 7].

Кристаллическая решётка Ni-Al моделировалась методом молекулярной динамики, атомы которой взаимодействовали посредством потенциала Морзе. Эксперименты проводились с использованием программы [8]. Способ создания начальной конфигурации расчётной ячейки, как предложено в [6], включал три стадии: построение, первичная релаксация 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 на-

правлениях, 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 0К.

Искусственно созданная граница раздела металлов подвергалась процедуре релаксации, в течение которой граничные атомы занимали равновесное положение. В результате релаксации наблюдалось повышение температуры ячейки до нескольких десятков Кельвин. Время релаксации ячейки составило 100 пс, на этап охлаждения было отведено 10 пс. Таких временных рамок эксперимента достаточно для того, чтобы ячейка успела избавиться от лишнего свободного объёма, который возникал на границе металлов при создании начальной структуры [6]. В итоге формировалась граница с характерными дислокациями несоответствия из-за различия постоянных решёток (рис. 1).

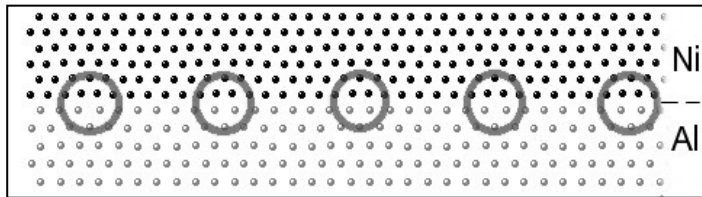


Рис. 1. Граница биметалла Ni-Al, с выделенными дислокациями несоответствия

Следующий этап эксперимента состоял из внедрения МА на различном расстоянии от границы биметалла. Внедрялись атомы Ni и Al поочерёдно в межузельное пространство никеля, пример внедрения представлен на рисунке 2. При дальнейшей релаксации ячейки происходили направленные смещения атомов по краудинному механизму в сторону границы, с последующим вытеснением атома из крайнего ряда в соседний металл.

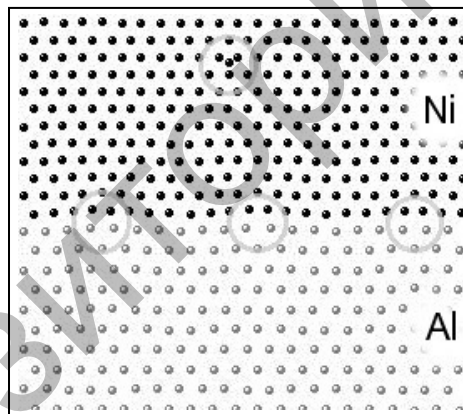


Рис. 2. Конфигурация ячейки после внедрения межузельного атома с выделением внедренного атома и ближайших к нему дислокаций несоответствия на границе биметалла Ni-Al

В результате серии компьютерных экспериментов было установлено, что внедрение МА приводит к направленному смещению атомов вдоль направления плотной упаковки до пересечения плотноупакованного ряда с границей металлов и вытеснению атома из крайнего ряда в кристаллическую решетку соседнего металла, при этом смещения атомов происходят в сторону ближайшей дислокации несоответствия. Таким образом, происходит своеобразная аннигиляция дефектов к более выгодному энергетическому состоянию системы. В результате подобного рода эстафетных атомных смещений происходит переползание дислокации на одно межатомное расстояние вглубь решётки Al (рис. 3).

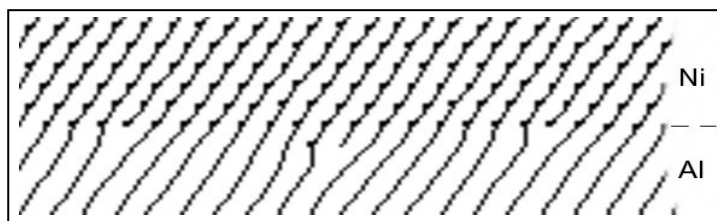


Рис. 3. Граница биметалла Ni-Al через 0,5 пс после эстафетных атомных смещений. По центру ДН переполза на одно межатомное расстояние в Al

При внедрении атома Ni глубина, на которой МА вызывал направленные эстафетные смещения в сторону ближайшей дислокации несоответствия на границе металлов, достигла 13–14 межатомных расстояний решётки от границы металлов. Следует отметить, чтобы добиться подобного эффекта далее 11 ряда атомов от границы, необходимо подогреть ячейку дополнительно. Так, для активации атомных смещений из 12 и 13 междурядья пришлось подогреть ячейку на 100 и 150 К, соответственно. Повышение температуры далее не приводило к увеличению расстояния внедрения межузельного атома от границы металлов, приводящего к направленному смещению атомов.

При внедрении атома Al глубина, на которой МА вызывал направленные смещения в сторону ближайшей дислокации несоответствия на границе металлов, достигла 11 межатомных расстояний решетки от границы металлов. В отличие от случая внедрения атома Ni, здесь ширина зоны, на которой температура выступает катализатором к активации атомных смещений, шире в 2,5 раза и составляет 5 межатомных расстояний. Для получения данного эффекта для крайних пяти значений производился подогрев ячейки на 100–250 К.

Характер смещения, независимо от типа внедрённого атома, обусловлен главным образом расстоянием внедрения атома от границы металлов. Прямолинейная траектория вдоль плотноупакованного ряда атомов свойственна при внедрении от 3 до 8 межатомных расстояний от границы металлов (рис. 4 б). При более близком расположении МА к границе возможно вытеснение атома не вдоль плотноупакованного ряда, а напрямую, т.е. сначала атом вытесняется в соседний металл, а потом происходит смещение ряда атомов вдоль границы металлов и ближайшая дислокация несоответствия заполняется (рис. 4 а). При более отдалённом расположении внедрённого атома (8 и более межатомных расстояний), зачастую, наблюдается ломаная траектория смещения атомов (рис. 4 в).

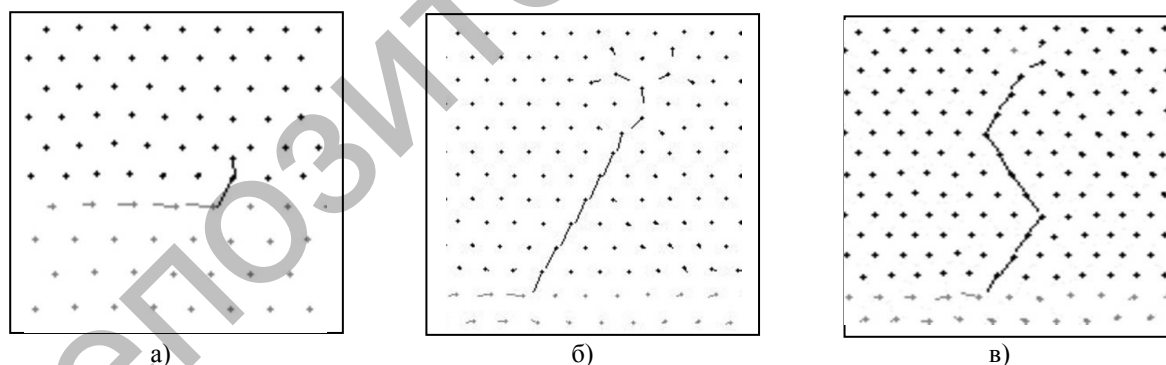


Рис. 4. Траектории эстафетных атомных смещений

В зависимости от вида траектории, различалось время, которое требуется для смещения вплоть до границы раздела металлов и вытеснения крайнего атома. В случае прямолинейной траектории данный процесс происходит быстрее по сравнению с траекторией, которая имеет ломаный характер. Это обусловлено, во-первых, более длинным путём до ближайшей дислокации несоответствия. Во-вторых, при изменении направления траектории эстафетных смещений может существовать промежуточное устойчивое состояние.

Для более детального изучения скорости процесса массопереноса получены графики зависимости времени, за которое происходят эстафетные атомные смещения от расстояния внедрения до границы металлов, представленные на рисунке 5 а и б. Данные временные зависимости включают в себя время на скорость активации процесса массопереноса, а также время самого массопереноса.

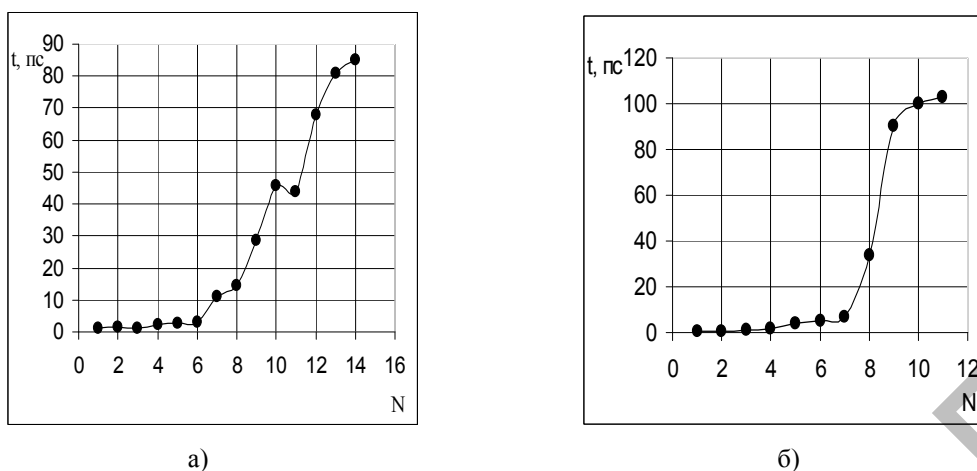


Рис. 5. Зависимость времени t эстафетных смещений атомов от расстояния внедрения МА, выраженного через число N межатомных расстояний плотноупакованного ряда, между МА и границей металлов а) внедрён Ni; б) внедрён Al

Дело в том, что сразу после запуска программы эстафетных смещений атомов в сторону границы не происходит, для этого требуется некоторое время. Это обусловлено колебаниями атомов около положения равновесия. Основная часть времени на данных зависимостях затрачивается именно на процесс первоначальной активации эстафетных атомных смещений.

По нашим оценкам, зависимость скорости «чистого» массопереноса, т.е. без учёта времени на активацию процесса, при внедрении МА Ni от расстояния между МА и дислокацией несоответствия носит характер, представленный на рисунке 6 а. Оценки даны при внедрении МА на расстояниях от 2 до 13 межатомных расстояний от границы биметалла. Соответствующий график при внедрении МА Al приведен на рисунке 6 б, максимальное расстояние внедрения составило 11 межатомных расстояний.

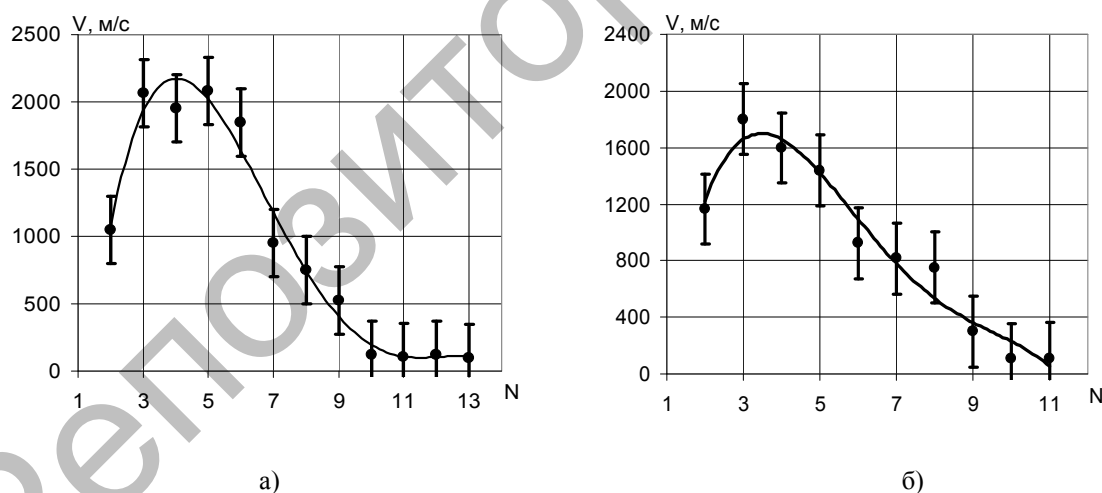


Рис. 6. Зависимость скорости массопереноса от расстояния, выраженного через число N межатомных расстояний плотноупакованного ряда, между МА и границей металлов. Зависимость приведена для случая внедрения атома а) — Ni; б) — Al (аппроксимация носит характер полиномиальной функции 4-й степени)

При внедрении МА порядка 2 межатомных расстояний от границы скорость значительно ниже, чем при 3–6 для случая Ni и 3–5 для случая Al. Это можно объяснить тем, что на данном расстоянии вытеснение МА происходит напрямую в соседний металл, а на участке от 3 до 6 для Ni и от 3 до 5 для Al межатомных расстояний вдоль плотноупакованного ряда. Далее происходит значительное падение скорости эстафетных смещений. Причиной, вызвавшей снижение скорости смещений, является уменьшение напряжения упругого поля дислокации.

Некоторые различия в численных значениях и наклоне аппроксимирующих кривых на рисунке 6 а и б обусловлены различием в упругом поле, создаваемом МА Ni и Al.

Оценка погрешностей для расчёта косвенных воспроизводимых измерений производилась по формуле (1):

$$F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\Delta x_i \frac{\partial F}{\partial x_i} \right)^2}, \quad (1)$$

где x_i — непосредственно измеряемые независимые величины, имеющие погрешность Δx_i .

Погрешность главным образом обусловлена фиксацией момента старта эстафетных атомных смещений.

Таким образом, следует отметить, что данные результаты по своему характеру схожи с результатами в [4], где в качестве аннигилирующих дефектов рассматривались межузельные атомы и вакансии. В [4] зависимость скорости массопереноса от расстояния между дефектами носит аналогичный характер при удалении дефектов на более чем 3 межатомных расстояния, однако отсутствует первоначальное снижение скорости при 2 межатомных расстояниях. Этот эффект в нашем исследовании вызван наличием границы биметалла. Кроме того, в [4] аннигиляция дефектов наблюдается на расстоянии не более 8 межатомных, в нашем случае при внедрении Ni возможен массоперенос до 11 межатомных расстояний без подогрева ячейки.

References

1. *Starostenkov M.D., Markidonov A.V. et al.* High-speed carrying over of weights to the crystal aluminum containing chains of vacancies and atoms, being between knots // Russian Physics J. — 2009. — Т. 52. — № 9/2. — P. 139–145.
2. *Starostenkov M.D., Markidonov A.V., Tihonova T.A., Medvedev N.N.* High-speed carrying over of weights to a two-dimensional crystal of nickel at presence dislocation loops of various local density // Izv. universities. Chernaya Metallurgy. — 2009. — № 6. — P. 57–60.
3. *Starostenkov M.D., Markidonov A.V., Medvedev N.N., Tikhonov T.A.* Modeling of carrying over of weight in the form of numbers of vacancies and the atoms which are between knots: Physics of Strength and plasticity of a materials. Abstracts of the XVII International Conf. — Samara, 2009. — P. 37.
4. *Markidonov A.V.* Bezdiffuzionnyj the mechanism of carrying over of weights in the crystals containing units of vacancies and atoms, being between knots: The Dissertation on competition of degree of the candidate of physical and mathematical sciences. — Barnaul, 2009. — 226 p.
5. *Shtremel M.A.* Durability of alloys. Part I. Lattice defects: A Textbook for high schools. — M.: MISA, 1999. — 384 p.
6. *Poletaev G.M.* Research of mutual diffusion processes in two-dimensional system Ni-Al: The Dissertation on competition of degree of the candidate of physical and mathematical sciences. — Barnaul, 2002. — 186 p.
7. *Popova G.V.* The stability of interfaces of composite materials of Ni-Al: The dissertation author's abstract on competition of degree of the candidate of physical and mathematical sciences. — Barnaul, 2006. — 22 p.
8. *Poletaev G.M.* Molecular dynamics simulations of structural and energy transformations in two-dimensional metals and alloys (MD2). The certificate about State Computer program registration. № 2008610486 from 25.01.2008.