

05

Механизм миграции дивакансионных комплексов в двумерном кристалле Ni_3Al

© М.Д. Старостенков, Е.А. Дудник, В.Г. Дудник

Алтайский государственный технический университет, Барнаул
E-mail: genphys@agtu.secna.ru

Поступило в Редакцию 12 марта 2003 г.

Методом молекулярной динамики исследован механизм трансформации дивакансий в комплексы, состоящие из межузельного атома и трех вакансий, особенности миграции таких комплексов в двумерном кристалле Ni_3Al .

В настоящее время достаточно определенно установлен вакансионный механизм диффузии атомов в металлических системах [1]. В то же время высказываются предположения о том, что в определенных условиях с вакансионным механизмом может конкурировать дивакансионный механизм диффузии [2]. В настоящей работе методом компьютерного моделирования установлен возможный дивакансионный механизм диффузии атомов применительно к двумерной системе интерметаллида Ni_3Al .

Двумерная структура интерметаллида представлялась гексагональной упаковкой, соответствующей упаковке плоскости $\{111\}$ сверхструктуры $L1_2$. Взаимодействия между различными парами атомов задавались парными центральными потенциалами Морза с параметрами, взятыми из [3]. Расчетная ячейка в эксперименте содержала 3000 атомов, за пределами ячейки двумерная упаковка повторялась с использованием периодических граничных условий. Для исследования диффузионных процессов использовался метод молекулярной динамики. Распределение скоростей колебаний атомов в зависимости от температуры задавалось через фактор Больцмана [4]. Пары вакансий располагались в стартовых конфигурациях на расстояниях от первой до пятой координационных сфер. Структурная перестройка вблизи комплексов дивакансий исследовалась при условии быстрого охлаждения кристалла после термоактивации. Было обнаружено, что с увеличением расстояния между парами вакансий изменяется температура активации структурной

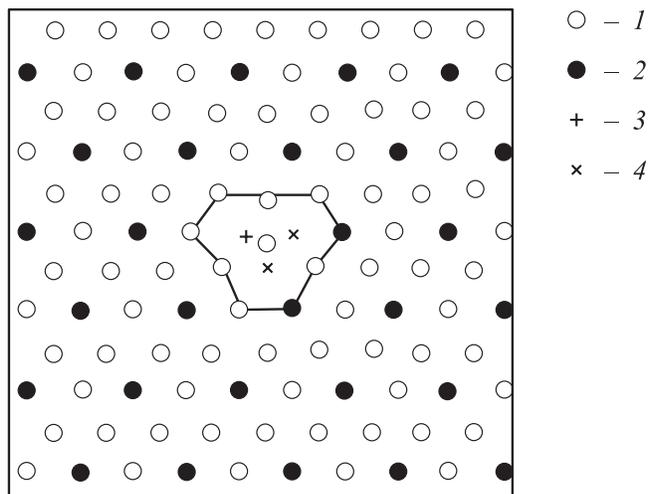


Рис. 1. Схема трансформации дивакансии в комплекс, состоящий из межузельного атома и трех вакансий в двумерном кристалле Ni_3Al . 1, 2 — позиции атомов Ni и Al. Вакансия в узле Al и вакансия в узле Ni — 3, 4. Линиями выделен усеченный треугольник ближайших соседей комплекса.

перестройки. Минимальная температура, при которой происходит перестройка комплекса, соответствует паре ближайших вакансий в узлах Al и Ni. В результате термоактивируемой релаксации при $T \approx 100$ К граница результирующего положения представляется деформированным усеченным треугольником со сторонами, включающими по два и три соседних атома. В центре такого треугольника располагается атом Ni в положении междоузлия. В пустотах внутри треугольника выделяются три вакансионных положения — два в узлах Ni и одно в узле Al (рис. 1). При повышении температуры до $T = 300$ К усеченный треугольник ближайших соседей межузельного атома смещается на один атомный ряд. При этом происходит следующая трансформация: на место центрального межузельного атома Ni перемещается атом Al, одно из положений усеченного треугольника занимает точечный дефект замещения в узле атома Al. При этом внутренняя энергия системы понижается на $\Delta E \approx 0.2$ eV.

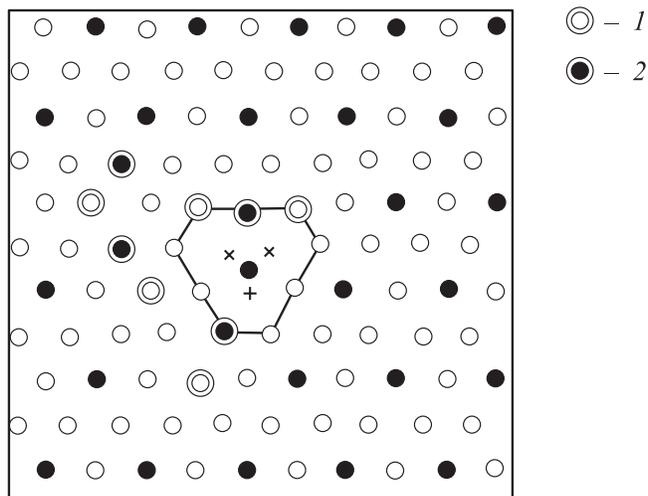


Рис. 2. Картина элементов разупорядочения, созданная дивакансией при $T = 900$ К в течение времени развития процесса, равного 15 ps. 1 и 2 — точечные дефекты замещения в узлах Ni и Al.

Структурная перестройка вблизи пары ближайших вакансий в узлах Ni–Ni происходит при температуре $T = 200$ К. В результате вновь выделяется усеченный треугольник ближайших соседей к междоузельному атому Al, вблизи которого располагаются две вакансии в узлах Ni и одна в узле Al. В результате релаксации не меняется внутренняя энергия начального и конечного состояний. С ростом температуры до $T = 300$ К усеченный треугольник ближайших соседей перемещается на один атомный ряд без образования точечного дефекта замещения.

Подобная перестройка при более высоких температурах обнаруживается вблизи пар вакансий, располагающихся во втором — четвертом соседстве. Однако при этом в процессе перестройки происходит образование дополнительных точечных дефектов замещения.

С ростом температуры и времени развития термоактивационного процесса наблюдается перемещение по кристаллу дивакансионного комплекса, трансформированного в комплекс: междоузельный атом и

три вакансии. При этом растет концентрация точечных дефектов замещения, создаваемых по пути движения системы: межузельный атом и три вакансии (рис. 2). Внутренняя энергия системы возрастает после быстрого охлаждения кристалла, так как в сверхструктуре возникают области разупорядочения.

Что касается подвижности дивакансионных комплексов, то по сравнению с одиночными вакансиями и отдельными точечными дефектами замещения первые оказываются наиболее активными. Компьютерный эксперимент показал, что одиночные вакансии активируются при температурах 450–500 К. Скорости их миграции оказываются меньшими, поэтому они вносят меньший вклад в процессы разупорядочения сверхструктуры с ростом температуры.

Эксперимент с кристаллом, содержащим только одиночный точечный дефект замещения, показал, что положение точечного дефекта замещения в структуре не меняется вплоть до температуры 1100–1200 К.

Если в кристалле Ni_3Al задается пара: отдельный точечный дефект замещения и одиночная вакансия на таких расстояниях, что между ними взаимодействие отсутствует, ситуация не меняется и в интервале температур 450–1100 К. Работает только механизм миграции отдельной вакансии в процессе разупорядочения сверхструктуры.

Однако на близких расстояниях между отдельным точечным дефектом замещения и вакансией структурная перестройка может привести к аннигиляции точечного дефекта замещения, затем процесс развивается по вакансионному механизму.

В заключение можно сделать следующие выводы. Подвижность дивакансионного комплекса связана прежде всего с подвижностью межузельного атома, наличием большего числа степеней свободы (меньшего числа связей) по сравнению с одиночной вакансией и точечным дефектом замещения. Если при движении атома на место одиночной вакансии ему необходимо преодолеть расстояние, равное межатомному, то в случае перемещения рассматриваемого дивакансионного комплекса перемещаются два атома на расстояние, равное половине межатомного расстояния (один атом из межузельного переходит в положение вакантного узла, другой — в межузельное положение).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 02-02-17875.

Список литературы

- [1] *Кристиан Дж.* Теория превращения в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978. 805 с.
- [2] *Орлов А.Н.* Введение в теорию дефектов в кристаллах. М.: Высш. школа, 1983. 144 с.
- [3] *Горлов Н.В.* Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B и $A_3B(C)$. Дис. на соис. степ. к.ф.-м.н. Томск, 1987. 214 с.
- [4] *Starostenkov M.D., Poletayev G.M., Starostenkov D.M.* // Journal of Materials Science & Technology. 2001. V. 17. N 1. P. 59–60.