

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИФфуЗИИ В МЕТАЛЛЕ ПРИ МОШНЫХ ИМПУЛЬСНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ ПУЧКА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Т.И. В а л е е в, В.П. К р и в о б о к о в,
С.Н. Я н и н

Обработка металлов мощными нано- и микросекундными пучками ионов является перспективным средством модификации их поверхности. Улучшение физико-химических свойств происходит благодаря структурно-фазовым превращениям и изменению пространственного распределения легирующих примесей [1].

Ранее сообщалось, что вблизи поверхности экспериментально наблюдается гигантское усиление миграции атомов [2], которое невозможно объяснить в рамках теории ионного перемешивания в твердой фазе или диффузией в расплаве, образующемся вследствие радиационного разогрева, т.к. полученные формальным путем на основе концентрационных профилей коэффициенты диффузии составляют величину $10^{-2}-10^{-4}$ см²/с (эти результаты впоследствии были подтверждены другими авторами). Использованный здесь термодинамический подход к описанию переноса показал, что в отличие от непрерывного облучения при импульсном облучении миграция атомов происходит преимущественно в поле градиента температуры, обусловленного кинетикой торможения ионов и теплофизическими свойствами среды. Однако установить, является ли характер миграции диффузионным и могут ли существующие здесь градиенты температуры привести к указанным выше коэффициентам, не удалось.

Аналогичная проблема имеет место и при воздействии интенсивного наносекундного лазерного излучения. Наблюдаемые экспериментально коэффициенты диффузии, а также градиенты температуры весьма близки к нашему случаю [3].

Цель данной работы - построить молекулярно-динамическую модель поверхности металла на примере алюминия в условиях воздействия концентрированного потока энергии, переносимого мощным наносекундным ионным пучком, с помощью которой дать заключение о том, является ли перенос диффузионным и, если да, то каким значениям коэффициента диффузии (с учетом фактора неравновесности температурного поля) он соответствует. Следует отметить, что молекулярно-динамическая задача с ненулевым градиентом температуры ранее не решалась [4].

Молекулярно-динамическая модель была реализована с расчетным кристаллитом, содержащим 2254 атома, из которых 1862 находились в базовой ячейке. Кристаллит имел форму вытянутого параллелепипеда, на двух противоположных гранях которого, перпендикулярных направлению градиента температур, находились неподвижные атомы для задания жестких граничных условий. В других направлениях применялись периодические граничные условия.

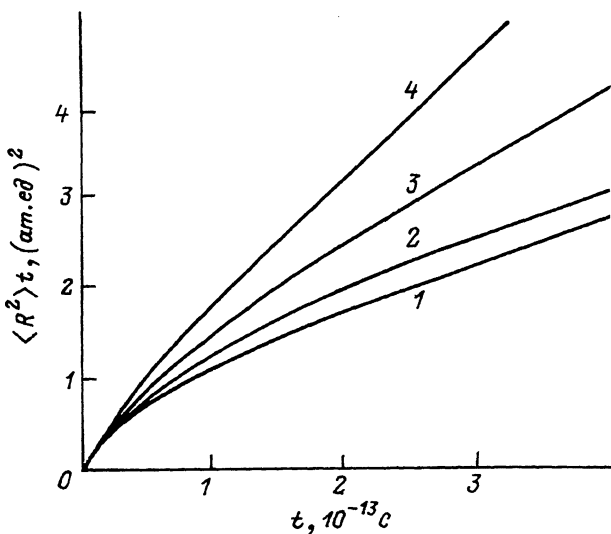


Рис. 1. Среднеквадратичное смещение атома при различных температурных режимах: 1 - $T=970$ К, 2 - $T=1050$ К, 3 - $T=1260$ К, 4 - $T=1470$ К.

В качестве начальной структуры расчетной ячейки бралась при- сушая алюминию в кристаллическом состоянии ЦК решетка, постоянная которой задавалась с учетом теплового расширения, соответствующего средней температуре кристаллита.

Для вычислений использовался потенциал межатомного взаимо- действия, полученный на основе метода псевдопотенциала с исполь- зованием форм-факторов Хейне-Абаренкова-Анималу. Обменно-кор- реляционные эффекты электронов проводимости учитывались на основании выражения Сингви [5].

Градиент температуры моделировался делением базовой ячейки на последовательные участки, атомам которых задавались скорости с помощью датчика случайных чисел в соответствии с распределени- ем Максвелла, исходя из ряда значений температур, отражающих выбранный градиент.

Временной шаг интегрирования уравнений движения выбирался таким образом, чтобы однократные смещения атомов не превышали наперед заданной малой величины, и составлял порядка 10^{-15} с.

На первом этапе среднеквадратичное смещение $\langle R^2 \rangle_t$, которое линейно связано с коэффициентом самодиффузии D

$$\langle R^2 \rangle_t = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\vec{R}_i(t) - \vec{R}_i(0)]^2 = 6Dt,$$

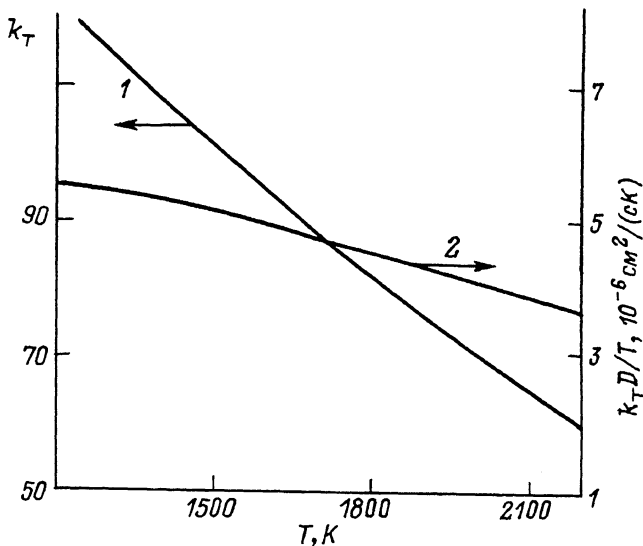


Рис. 2. Зависимость термодиффузионного отношения (1) и диффузионного потока (2) от температуры.

рассчитывалось с нулевыми значениями градиентов температуры и давления (здесь $\bar{R}_i(t)$ – положение i -й частицы в ансамбле из N частиц в произвольный момент времени t). Результаты этих расчетов приведены на рис. 1. Кривые выходят на область квазилинейности через время $t \approx 10^{-13}$ с, которое необходимо для разрушения кристаллической структуры в ячейке.

Таким путем была получена зависимость коэффициента самодиффузии от температуры T , которая хорошо аппроксимируется выражением $D = 4 \cdot 10^{-4} \exp \{-4.66 \text{ ккал/г/атом}/(RT)\} \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, практически совпадающим с экспериментальными данными для алюминия в жидкой фазе [6], что свидетельствует о корректности построенной модели.

Принимая во внимание, что диффузионный поток в поле градиента температуры определяется следующим выражением:

$$j = k_T n_0 D \frac{\nabla T}{T},$$

где k_T – термодиффузионное отношение, n_0 – концентрация атомов, нетрудно видеть, что термодиффузионное отношение может быть получено на основе молекулярно-динамических расчетов потоков, коэффициента диффузии и параметров поля температуры.

Температурная зависимость k_T и $k_T D / T$ (диффузионный поток, нормированный на единичный градиент температуры) представлена на рис. 2. Снижение k_T по мере роста T является результатом

проявления стохастического характера перемещения атомов: в области высоких температур перенос в поле ∇T слабо ощутим на фоне случайных блужданий.

Из уравнения теплопроводности можно получить характеристики поля температур радиационного разогрева и их градиентов с учетом потерь энергии на фазовые превращения [7]. Используя эти данные, а также термодиффузионное отношение K_T , полученное выше (очевидно, для гетеродиффузии в области малых концентраций диффузанта K_T имеет тот же порядок, что и для самодиффузии), легко установить, что расчетные концентрационные профили хорошо согласуются с экспериментальными [8].

Таким образом, гигантское усиление подвижности атомов при мощном нано- (микро) секундном воздействии носит диффузионный характер. Однако полученные здесь результаты приводят к мысли о новом представлении механизма имплантации атомами отдачи в импульсном режиме. Перенос в поле градиента температуры является доминирующим фактором на фоне баллистического перемешивания и радиационно-ускоренной диффузии по вакансиям. Аналогичный процесс, видимо, должен иметь место и при импульсном лазерном воздействии.

Авторы благодарят В.А. Полухина за помощь в анализе результатов.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Д и д е н к о А.Н., Л и г а ч е в А.Е., К у р а к и н И.Б. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1987. 184 с.
- [2] Д и д е н к о А.Н., А с а и н о в О.Х., К р и в о б о - к о в В.П., Л и г а ч е в А.Е., С а п у л ь с к а я Г.А. В кн.: Физика электронных и атомных столкновений. Л., 1987. С. 188-198.
- [3] D o n a d a l l e Rose L.F., M i o t e l l o A. Interplay of soret vs. normal impurity diffusion during laser or e-beam induced heat flow transients in metals, in: Laser and electron-beam interactions with solids, ed. B.R. Appleton and G.K. Celler. Copyright 1982 by Elsevier Science Publishing Company. P. 425-430.
- [4] П о л у х и н В.А., В а т о л и н Н.А. Моделирование аморфных металлов. М.: Наука, 1985. 288 с.
- [5] У х о в В.Ф., В а т о л и н Н.А., Г е л ь ч и н - с к и й Б.Р., Б е с к а ч к о В.П., Е с и н О.А. Межчастичное взаимодействие в жидких металлах. М.: Наука, 1979. 195 с.
- [6] В и л с о н Д.Р. Структура жидких металлов и сплавов. М.: Металлургия, 1972. 247 с.

- [7] А с а и н о в О.Х., К р и в о б о к о в В.П., Л и г а - ч е в А.Е., С а п у л ь с к а я Г.А. // Физика и химия обработки материалов. 1987. № 2. С. 53-59.
- [8] Д и д е н к о А.Н., К р и в о б о к о в В.П. // ЖТФ. 1988. Т. 58. № 10. С. 2002-2009.

Поступило в Редакцию
12 января 1989 г.
В окончательной редакции
10 апреля 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 12.
01

26 июня 1989 г.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РАЗЛИЧНЫХ РАЗМЕРНОСТЕЙ ХАОТИЧЕСКОГО АТТРАКТОРА

В.С. А н и щ е н к о, М.А. С а ф о н о в а

Свойства хаотических аттракторов характеризуются различными размерностями, количественное соответствие которых пока дается оценками типа неравенств и в общем случае требует специальных теоретических исследований [1-3]. Представляется целесообразным проведение численных экспериментов по расчету различных закономерностей хаотического аттрактора и детальное их сопоставление. С этой целью рассмотрим режим развитой стохастичности в динамической системе [4]

$$\begin{aligned} \dot{x} &= mx + y - xz, & \dot{y} &= -x, & \dot{z} &= g[z - I(x)x^2] \\ I(x) &= 1(x > 0), & 0 &(x \leq 0) \end{aligned} \quad (1)$$

при значениях параметров $m = 1.5$ и $g = 0.2$, которым отвечает аттрактор седло-фокусного типа, представленный на рис. 1, а. Вначале рассчитаем размерности двумерного хаотического множества, реализующегося в сечении Пуанкаре. Экспериментально было подтверждено, что величина размерностей не зависит от выбора секущей поверхности. Полная размерность D аттрактора в трехмерном фазовом пространстве системы (1) связана с размерностью хаотического множества в сечении Пуанкаре соотношением

$$D = d + 1. \quad (2)$$

Численным интегрированием (1) с начальными данными на аттракторе формировался массив данных, из $3.18 \cdot 10^4$ точек в секущей $x = 0$, который рассматривался как двумерный хаотический аттрактор (см. рис. 1, б). Для вычисления размерностей этот аттрактор