

01;05.1;11

©1994

## О ВЛИЯНИИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ПРОБЛЕМЕ УСТОЙЧИВОСТИ ДВУМЕРНЫХ АТОМНЫХ РЕШЕТОК

*С.Г. Псазье, А.И. Дмитриев*

Изучение структурных особенностей плоских решеток и их устойчивости тесно связано с проблемой изучения закономерностей формирования и эволюции поверхностных фаз [1,2], играющих важную роль во многих современных так называемых "высоких" технологиях. Наряду с этим изучение двумерных (2D) моделей позволяет исследовать и общие закономерности поведения конденсированных сред. Поэтому многочисленные работы, посвященные моделированию поведения и свойств конденсированных сред, проводятся в 2D приближении [3-7]. При этом во всех случаях необходимо исследовать устойчивость моделируемой структуры. Так, в [8] показано, что квадратная решетка при конечных температурах теряет устойчивость и переходит в плотноупакованную структуру. Как правило, подобные эффекты связываются с температурным воздействием, в то же время структурная неустойчивость может проявляться и под влиянием различных дефектов. Исследованию этого вопроса и посвящена настоящая работа. Для этой цели на основе метода молекулярной динамики (ММД) проведено моделирование эволюции атомной структуры  $\alpha$ -Fe при различных температурах и с учетом наличия точечных дефектов.

Все вычисления проводились для плоского кристаллита, соответствующего плоскости (011) ОЦК кристалла. Система координат была ориентирована так, что ось OY соответствовала направлению  $\langle 01\bar{1} \rangle$  в решетке ОЦК, а ось OX — направлению  $\langle 100 \rangle$ . Для задания межатомного взаимодействия в  $\alpha$ -Fe использовался потенциал Морзе [9]. Все вычисления выполнены в атомной системе единиц, в которой заряд и масса электрона, радиус Бора и постоянная Планка равны единице. Уравнения движения интегрировались с шагом по времени  $\Delta t$ , равным 100 атомным единицам времени.

Для учета взаимодействия кристаллита с окружающей средой в направлении оси OX использовались периодические граничные условия. Вдоль оси OY задавались стохастические граничные условия, эффективно учитывающие

температуру внешнего окружения. Особенность таких граничных условий состоит в том, что на каждом временном шаге положениям граничных атомов присваиваются стохастические смещения из положения равновесия, нормируемые определенной температурой. Задавая положение граничных атомов таким образом, удается учесть не только влияние температуры, но и внешнего шума среды, который в ряде случаев может играть важную роль [10-11]. Задаaniem направления и скорости дрейфа граничных атомов в этом случае можно имитировать различные типы механического нагружения. В данном случае скорость дрейфа граничных атомов равнялась нулю, что соответствует моделированию изохорического процесса.

Анализ результатов моделирования проводился на основе построения атомных конфигураций фрагмента в различные моменты времени, полей скоростей атомов, их смещений на каждом временном шаге, а также траекторий движения атомов за различные интервалы времени. Для изучения эволюции атомной структуры проводился анализ функции радиального распределения атомов (RDF) в различные моменты времени. Соответствующая исходной структуре RDF приведена на рис. 1, а.

Изучение эволюции атомной структуры при различных температурах показало, что при  $T \approx 50$  К происходит перестройка исходной структуры\*. В этом можно убедиться, сравнивая пики RDF для  $t = 1300\Delta t$  с радиусами координационных сфер исходной структуры (рис. 1, б). Так, если в исходной структуре можно выделить 6 явно выраженных пиков RDF, то для  $t = 1300\Delta t$  их вид заметно изменился. Произошло слияние координационных сфер с формированием новой структуры, которая характеризуется тремя явно выраженными пиками RDF. Такая конфигурация структуры кристаллита близка к плотноупакованной с кратчайшим межатомным расстоянием  $R_0 = 4.86$  атомных единиц. При меньших температурах изменения структуры кристаллита не происходит, а имеет место лишь "тепловое" уширение пиков RDF (рис.1, в). Можно видеть, что при этом хорошо разделимы даже две близкие, 4-я и 5-я, координационные сферы.

Для исследования влияния вакансий на возможность перехода исходной структуры в плотноупакованную в работе моделировался кристаллит, атомная конфигурация которого показана на рис. 2, а. Эволюция такой системы исследовалась при  $T = 20$  К и ее можно проследить на рис. 2, а,

\* Вследствие двумерности задачи значение температуры является условным и не соответствует трехмерному случаю, так как температуре плавления моделируемого кристаллита соответствует  $T \approx 120$  К.

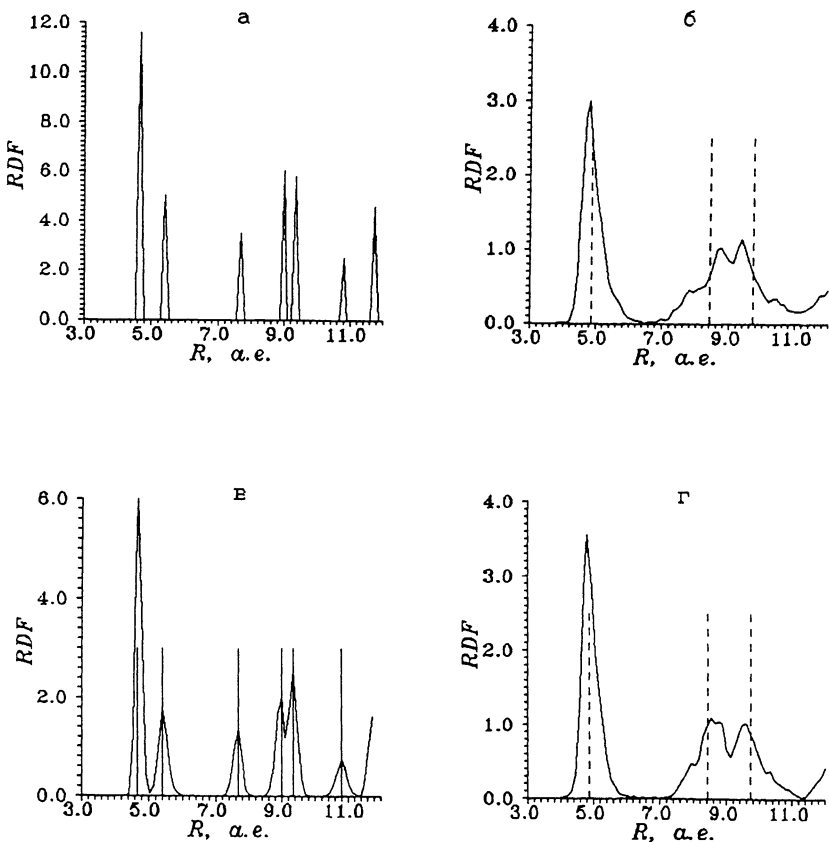
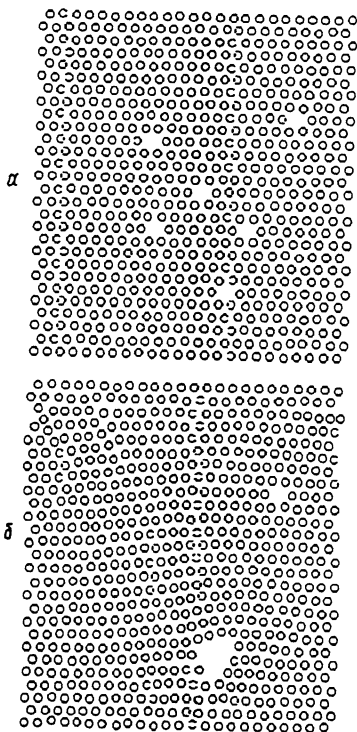


Рис. 1. Рис. 1. Функция радиального распределения плотности атомов. Сплошные вертикальные линии соответствуют положениям пиков RDF начальной структуры, пунктирные — положениям координационных сфер при плотной упаковке.

*a* — для исходной структуры, *б* — в результате термически активируемого перехода при  $T = 50$  К, *в* — при  $T = 20$  К, *г* — установившаяся структура кристаллита с вакансиями при  $T = 20$  К.

*б*. Отметим, что до некоторого момента времени никаких заметных изменений в системе не происходит. Атомы продолжают совершать колебания около своих положений равновесия и слияния пиков RDF не наблюдается. Однако в  $t = 550\Delta t$  атомная структура начинает перестраиваться и при этом наблюдается процесс миграции вакансий и их объединение в микропоры (рис.2, *б*). Эти микропоры по существу играют роль центров “конденсации” избыточного объема, возникающего вследствие изохорической постановки задачи.



**Рис. 2.** Структура моделируемого кристаллита в различные моменты времени: *а* — 100 шаг, *б* — 1800 шаг.

Следует отметить, что в случае перестройки атомной структуры при наличии вакансий, формируемая конфигурация кристаллита ближе к плотноупакованной (рис. 1, *з*), чем при термически активируемом переходе (рис. 1, *б*), что обусловлено существованием стока для избыточного объема. При этом, как видно из рис. 1, *з*, несмотря на достаточно высокую концентрацию вакансий, плавление в системе не происходит, то есть перестройка структуры реализуется в твердой фазе.

Полученные результаты показали также, что при исследовании  $2D$  кристаллитов на основе метода МД необходимо более корректно подходить к вопросу об определении устойчивости моделируемой атомной структуры. Это связано с тем, что при одних и тех же условиях наличие дефектов может нарушить устойчивость исходной структуры и привести к ее перестройке.

## Список литературы

- [1] Кантер Б.З., Никифоров А.И., Стенин С.И. // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. В. 21. С. 1963.
- [2] Зотов А.В., Саранин А.А., Лифшиц В.Г., Храпцова Е.А. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 24. С. 1.
- [3] Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Данилов В.И. и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушения. Новосибирск: Наука, 1990.
- [4] Мозилевский М.А., Мышкин И.О. // ФГВ. 1985. Т. 21. В. 3.
- [5] Liu G., Zhang R., Yu W. // J.Phys. 1988. Т. 49. Colloque C3, supplement an N 9.
- [6] Мозилевский М.А., Мышкин И.О. // ФГВ. 1978. Т. 14. В. 5.
- [7] Псахье С.Г., Коростелев С.Ю., Панин В.Е. // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. В. 18. С. 1645.
- [8] Жуков В.С. // Деп. рук. ВИНТИ. N2097-B88. 1988.
- [9] Girifalco L.A. and Weizer V.G. // Phys. Rev. 1959. V. 114. N 3. P. 687-690.
- [10] Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом фазовые переходы. М.: Мир, 1987. 400 с.
- [11] Анищенко В.С., Нейман А.Б. // Письма в ЖТФ. 1990. Т. 16. В. 7. С. 21.

Институт физики  
прочности и материаловедения  
Томск

Поступило в Редакцию  
27 января 1994 г.

