

На правах рукописи

Аксенов Михаил Сергеевич

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ МИГРАЦИИ И АГРЕГАТИЗАЦИИ
ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ГЦК МЕТАЛЛАХ**

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Издано в авторской редакции.

Подписано в печать 30.05.2006. Формат 60x84 1/16.

Гарнитура Times.

Печать – ризография. Усл.п.л. 1,63. Тираж 100 экз. Заказ 2006-

Издательство Алтайского государственного технического университета

им. И.И. Ползунова.

656038 г. Барнаул, пр-т Ленина, 46.

Лицензия на издательскую деятельность ЛР № 020822 от 21.09.98.

Отпечатано на кафедре НГиГ АлтГТУ.

Барнаул - 2006

Работа выполнена в Алтайском государственном техническом университете

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Старостенков М.Д.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Баранов М.А.
доктор физико-математических наук,
профессор Сагалаков А.М.

Ведущая организация: Кемеровский Государственный Университет

Защита состоится "5" июля 2006 г. в 11⁰⁰ час. на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете по адресу: 656049, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского государственного технического университета.

Автореферат разослан 2006 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук



Жданов А.Н.

7. Аксенов М.С., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю., Старостенков М.Д. Исследование самодиффузии в одноосно деформированных двумерных металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – №2. – С.64-67.
8. Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Исследование механизмов диффузии по границам зерен наклона в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – №2. – С.124-129.
9. Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Аксенов М.А. Старостенков М.Д. Механизмы диффузии по границам зерен в двумерных металлах // Письма в ЖТФ. – 2005. – Т.31, №15. – С.44-48.
10. Аксенов М.С., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Механизм образования сдвиговых деформаций при одноосной деформации растяжения-сжатия в двумерных металлах / Физика и образование: Сборник научных статей, под ред. Голубя П.Д. Барнаул, изд-во БГПУ. – 2005. – С.87-90.
11. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Краснов В.Ю., Ракитин Р.Ю., Аксенов М.С. Молекулярная динамика: основные проблемы моделирования // Труды 9-й междунар. научн.-техн. конференции “Композиты – в народное хозяйство” (Композит – 2005), Барнаул: изд-во АлтГТУ. – 2005. – С.87-91.
12. Аксенов М.С., Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Локально инициированные упругие волны в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – №3. – С.9-13.
13. Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Механизмы структурной трансформации вблизи границ зерен в ГЦК металлах в условиях деформации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – №3. – С.46-50.
14. Ракитин Р.Ю., Аксенов М.С., Пучин С.Л., Краснов В.Ю. Использование метода молекулярной динамики для изучения микромеханизмов диффузии / Физика и образование: Сборник научных статей, под ред. Голубя П.Д. Барнаул, изд-во БГПУ. – 2005. – С.84-86.
15. Ракитин Р.Ю., Аксенов М.С. Исследование зернограницной диффузии методом молекулярной динамики в Al, Ni, Cu / Физика и образование: Сборник научных статей, под ред. Голубя П.Д. Барнаул, изд-во БГПУ. – 2005. – С.90-95.
16. Аксенов М.С., Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Краснов В.Ю., Старостенков М.Д. Стабильность вакансионных кластеров в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – №4. – С.24-31.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справ. - М.: Металлургия, 1989. - 384 с.
2. Штремель М.А. Прочность сплавов. - Ч 1. - Дефекты решетки. - М.: Металлургия, 1982. - 280 с.
3. Волленбергер Г.Й. Точечные дефекты. - В кн.: Физическое металловедение. т.3. Физико-механические свойства металлов и сплавов/ Под. ред. Р. Кана. - М.: Мир, 1987. - С.5-74.
4. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. - Киев: Наукова думка, 1987. - 511 с.
5. Смитлз К.Дж. Металлы: Справ. - М.: Металлургия, 1980. - 447 с.
6. Ультразвук. Маленькая энциклопедия/ Под ред. И.П. Голямина, М.: Советская энциклопедия, 1979. - 400 с.
7. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. М: Атомиздат, 1972. - 600 с.

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

1. Poletaev G.M., Aksenov M.S., Starostenkov M.D., Patzeva J.V. The dynamics of locally initiated elastic waves in two-dimensional metals// Book of Abstracts of China-Russia Seminar on Materials Physics Under Ultra-conditions 2003, Yanshan University, Qinhuangdao, China, P.6.
2. Poletaev G.M., Aksenov M.S., Starostenkov M.D., Patzeva J.V. Locally initiated elastic waves in 2D metals// Book of Abstracts of 4th International Conference on Materials Structure and Micromechanics of Fracture (MSMF-4), Brno, Czech Republic, 2004. - P.108.
3. Starostenkov M., Poletaev G., Aksyonov M., Dyomina I. Relaxation of two-dimensional Al and Ni3Al crystal structures at the impulsive heating// Book of Abstracts of 2nd International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM-II), Los-Angeles, USA, 2004. - ID: 806.
4. Poletaev G.M., Aksenov M.S., Starostenkov M.D., Patzeva J.V. Locally Initiated Elastic Waves in 2D Metals// Materials Science Forum, 2005 (March), V.482. - P.143-146.
5. Rakitin R.Yu., Poletaev G.M., Aksenov M. S., Starostenkov M. D. Mechanisms of Grain-Boundary Diffusion in Two-Dimensional Metals// Technical Physics Letters. - 2005. - V.31, №8. - P.650-652.
6. Ракитин Р.Ю., Поletaев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование диффузии по границам зерен в двумерных металлах// Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2005. - №2. - С.5-8.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Диффузия играет важную роль во многих процессах, протекающих в металлах и сплавах. В условиях термодинамического равновесия, как известно, самодиффузия в кристаллах осуществляется преимущественно по вакансионному механизму. Тем не менее, для многих металлов обнаружено отклонение от закона Аррениуса: параметры самодиффузии отличаются для областей средних и высоких температур. В различных работах это объясняется либо существенным вкладом при высоких температурах второстепенных механизмов диффузии, либо следствием температурной зависимости упругих модулей. Так или иначе, для ответа на этот вопрос необходимо иметь представление о различных механизмах диффузии и их вкладе в зависимости от температуры. В настоящее время нет однозначного мнения относительно второго по вкладу, после вакансионного, механизма самодиффузии в ГЦК кристаллах. В различных работах на эту роль выдвигают миграцию бивакансий, циклические механизмы, образование и рекомбинацию динамических пар Френкеля, миграцию вакансий сразу во вторую координационную сферу и т.д. Таким образом, представляется актуальным исследование основных механизмов самодиффузии и их вкладов при равновесной концентрации точечных дефектов.

Неравновесная концентрация точечных дефектов образуется в результате экстремальных воздействий: быстрого охлаждения, пластической деформации, радиационного повреждения. В последнем случае возможно достижение наибольших концентраций точечных дефектов. Исследования изменений физических свойств материалов, подвергнутых радиационному воздействию, а также проблема воздействия радиации на структуру материалов, являются весьма актуальными проблемами физики твердого тела и радиационного материаловедения. Основные аспекты этих проблем, имеющие практическое значение: создание конструкционных материалов с улучшенными и новыми свойствами с возможностью управления радиационной стойкостью. Образующиеся в процессе облучения радиационные нарушения вызывают существенное изменение физико-механических свойств, особенно характеристик прочности материала. В настоящее время выяснено, что степень радиационного упрочнения материала зависит в первую очередь от конечной дефектной структуры облучаемого металла, то есть от концентрации, размеров и типов скоплений точечных дефектов, являющихся барьерами на пути движения дислокаций. Выяснено также, что упрочнение в большей степени обусловлено субмикроскопическими кластерами вакансионного и межузельного типов размером до ~5 нм. К ним относят дислокационные петли, обедненные зоны и поры. Для выяснения полной картины радиационного упрочнения и сопутствующих явлений необходимо детальное исследование дефектообразования в радиационно поврежденных металлах. Несмотря на большое число работ, выполненных в данном направлении, в настоящее время остаются нерешенными следующие вопросы:

шенными ряд вопросов. Это связано с ограничениями экспериментальных методов наблюдения структуры облученных материалов, и в особенности динамики структуры в процессе дефектообразования. Для исследования процессов агрегатизации точечных дефектов, роста и трансформации субмикроскопических кластеров наиболее эффективным оказывается применение метода компьютерного моделирования, который позволяет с достаточной точностью в рамках модели учитывать и контролировать параметры исследуемого явления, изучать в динамике процессы, протекающие на атомном уровне с использованием различных наглядных визуализаторов структуры.

Цель работы заключается в изучении механизмов миграции и агрегатизации точечных дефектов в ГЦК металлах с помощью метода молекулярной динамики.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что впервые проведен сравнительный анализ вклада различных механизмов самодиффузии в ГЦК металлах в зависимости от температуры. Изучена форма фронтов продольных и поперечных упругих волн при локальном их инициировании в ГЦК кристаллах. Выявлены механизмы кластерообразования при агрегатизации вакансий и межузельных атомов. Показано, что субмикроскопические вакансионные кластеры состоят преимущественно из тетраэдров дефектов упаковки, а кластеры межузельных атомов имеют тенденцию к образованию комплексов из параллельных краудионов в направлении $\langle 110 \rangle$. Дано описание механизмов быстрого зарождения тетраэдров дефектов упаковки из обедненных зон, а также их трансформации при поглощении точечных дефектов. Показано, что межузельный атом в ГЦК металлах мигрирует посредством, как минимум, двух механизмов: смещения и поворота гантели $\langle 100 \rangle$ и краудионного механизма.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что полученные результаты могут быть использованы для развития теории диффузии, для создания математических моделей диффузионных процессов, учитывающих вклад рассмотренных в настоящей работе механизмов. Обнаруженные в настоящей работе механизмы агрегатизации точечных дефектов, трансформации обедненных зон, зарождения и роста субмикроскопических кластеров могут быть использованы для расширения теоретических представлений о радиационном повреждении и явлениях с ним связанных. Кроме того, результаты компьютерного моделирования могут применяться в качестве демонстрационного материала для студентов физических специальностей, на их базе возможно создание работ для лабораторного практикума.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Вторым по вкладу механизмом самодиффузии в ГЦК металлах, после вакансионного, является миграция бивакансий. Механизм, заключающийся в образовании и рекомбинации динамических пар Френкеля, вносит существенно меньший вклад.
2. Субмикроскопические вакансионные кластеры в ГЦК металлах состоят преимущественно из тетраэдров дефектов упаковки.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Вторым по вкладу механизмом самодиффузии в ГЦК металлах, после вакансионного, является миграция бивакансий. Механизм, заключающийся в образовании и рекомбинации динамических пар Френкеля, вносит существенно меньший вклад. Миграция вакансий сразу во вторую координационную сферу в ГЦК кристаллах маловероятна.
2. При локальной инициации фронт упругих продольных волн, в связи с анизотропией скорости распространения, на начальном этапе имеет форму усеченного куба, грани которого составляют семейство плоскостей $\{100\}$. Фронт поперечных волн состоит из пар симметрично расходящихся в направлениях $\langle 110 \rangle$ от места инициации эллипсообразных выпуклых поверхностей-фронтов. Число расходящихся пар фронтов поперечных волн зависит от направления первоначального импульса: пара фронтов возникает, если проекция первоначального импульса на направление типа $\langle 110 \rangle$ не равна нулю. Поперечные волны служат источниками вторичных продольных волн.
3. При агрегатизации вакансий в обедненных зонах основными промежуточными кластерами в ГЦК металлах являются: бивакансии, объемные три-, тетра- и пентавакансии, небольшие ТДУ и сдвоенные ТДУ. В процессе отжига эти кластеры объединяются в один или несколько кластеров, состоящих из ТДУ. Поры образуются из обедненных зон с локальной концентрацией вакансий в них порядка нескольких десятков процентов.
4. Высокая скорость зарождения ТДУ объясняется согласованной трансформацией структуры в обедненной зоне. Механизм трансформации обедненных зон в ТДУ заключается в образовании согласованных смещений тетраэдрических групп атомов в направлениях $\langle 111 \rangle$ в область с избыточным свободным объемом.
5. В зависимости от концентрации вакансий в обедненных зонах выделено четыре варианта низкотемпературной трансформации обедненных зон: образование обособленных субмикроскопических кластеров, формирование ТДУ, образование сдвигов тетраэдрических групп атомов более чем в четырех направлениях $\langle 111 \rangle$ к центру обедненной зоны, порообразование.
6. Дано описание этапов трансформации ТДУ при поглощении точечных дефектов.
7. Межузельный атом мигрирует посредством не одного, а, как минимум, двух механизмов: смещения и поворота гантели $\langle 100 \rangle$ и краудионного механизма. При этом чаще имеет место реализация первого механизма.
8. Субмикроскопические кластеры межузельных атомов имеют тенденцию к образованию комплексов из параллельных краудионов в направлении $\langle 110 \rangle$. Дислокационные петли внедрения при термоактивации могут перестраиваться в комплексы из параллельных краудионов в результате перехода межузельных атомов из позиций в тетраэдрических порах в краудионные конфигурации.

плоскости $\{111\}$, объемные краудионные комплексы (ОКК) – параллельные краудионы в различных соседних плоскостях $\{111\}$ и дислокационные петли внедрения в плоскости $\{111\}$. Для каждого кластера была рассчитана работа ΔE , которую необходимо затратить на помещение атомов из бесконечности в идеальный расчетный блок в соответствующую конфигурацию рассматриваемого кластера с учетом релаксации структуры. На рис.13 изображена зависимость величины $\Delta E/n$ от числа межузельных атомов в кластере, для различных типов кластеров в Ni.

Как видно из рис.13, наиболее энергетически выгодными кластерами при числе межузельных атомов до 150 оказались объемные краудионные комплексы.

При введении в расчетный блок высокой (до 1%) концентрации межузельных атомов они стремились, как правило, образовать объемные краудионные комплексы (рис.14а). Как видно из (рис.14а), поле напряжений типичного субмикроскопического ОКК имеет форму параллелепипеда, грани которого расположены в плоскостях $\{111\}$. Внутри ОКК атомы имеют энергию связи, значительно отличающуюся от энергии связи в идеальном кристалле, - напряжения сжатия наблюдаются в основном по боковым граням ОКК.

В некоторых случаях при локальной концентрации межузельных атомов выше 25% в зонах диаметром $6a$, $7a$ и $8a$ образовывался кластер, представляющий собой октаэдр дефектов упаковки (рис.14б) Эта конфигурация являлась метастабильной и при отжиге, как правило, трансформировалась в ОКК.

Дислокационные петли при длительном отжиге в настоящей работе перестраивались в объемные краудионные комплексы. При этом, очевидно, происходил переход межузельных атомов из позиций в тетраэдрической поре в краудионную конфигурацию. При этом диффузионная подвижность кластера увеличивалась.

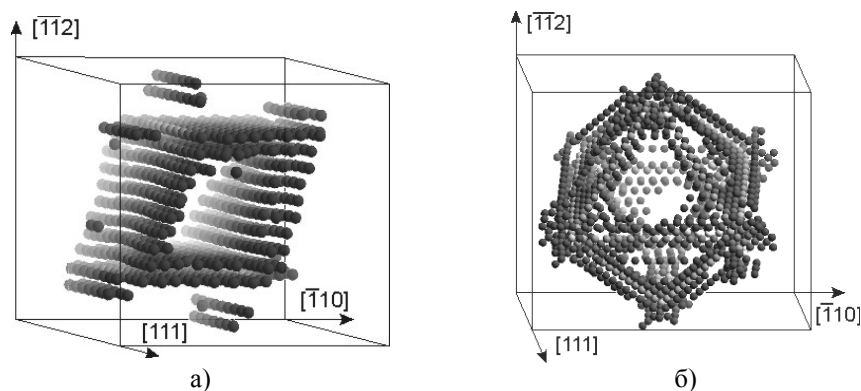


Рис.14. Распределение потенциальной энергии в расчетном блоке, содержащем ОКК (а) и октаэдр дефектов упаковки (б).

3. Субмикроскопические кластеры межузельных атомов в ГЦК металлах имеют тенденцию к образованию комплексов из параллельных краудионов в направлении $\langle 110 \rangle$.

Апробация работы. Результаты работы доложены на международных и российских конференциях:

China-Russia Seminar on Materials Physics Under Ultra-conditions 2003, Qinhuangdao, China (2003); 4th International Conference on Materials Structure and Micromechanics of Fracture (MSMF-4), Brno, Czech Republic (2004); 2nd International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM-II), Los-Angeles, USA (2004); Научно-методическая конференция “Физика и образование”, Барнаул (2005); VIII международная школа-семинар “Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Компьютерное моделирование”, Барнаул (2005); 9-й междунар. научн.-техн. конференции «Композиты – в народное хозяйство» (Композит - 2005), Барнаул (2005).

Публикации. Результаты работы опубликованы в 13 статьях в центральных и зарубежных изданиях и 3 тезисах докладов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 160 наименований. Работа изложена на 179 страницах машинописного текста, содержит 17 таблиц и 36 рисунков.

На всех этапах работы руководство осуществлялось к.ф.-м.н., докторантом Полетаевым Г.М.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

В первой главе диссертации проводится обзор имеющихся на данный момент теоретических представлений о механизмах самодиффузии в металлах. Дается описание существующих экспериментальных методов исследования диффузии. Рассматривается проблема дефектообразования и агрегатизации точечных дефектов при радиационном повреждении металлов. В конце первой главы сделана постановка задачи.

В настоящей работе использовался метод молекулярной динамики. Для рассмотрения были выбраны типичные ГЦК металлы: Ni, Cu, Al.

Вторая глава посвящена проблеме моделирования миграции и агрегатизации точечных дефектов в ГЦК кристаллах. Дается описание метода молекулярной динамики, рассматриваются основные проблемы, возникающие при компьютерном моделировании. Приводится обоснование выбора потенциалов межатомного взаимодействия, используемых в модели, и их апроба-

ция на адекватное описание теплового расширения. Описываются основные визуализаторы и характеристики динамики атомной структуры, применяемые в работе.

Для описания межатомных взаимодействий в настоящей работе использовались парные центральные потенциалы Морза:

$$\varphi(r) = D\beta e^{-\alpha r} (\beta e^{-\alpha r} - 2) \quad (1)$$

где α , β , D – параметры потенциала; r – расстояние между атомами.

Параметры потенциала определялись с учетом пяти координационных сфер, из свойств чистых металлов – энергии сублимации, параметра решетки, объемного модуля упругости.

Температура расчетной ячейки задавалась через начальные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла. При этом полная кинетическая энергия соответствовала заданной температуре, а суммарный импульс расчетной ячейки был равен нулю.

Расчетный блок кристалла включал от 1700 до 125000 атомов. В зависимости от решаемой задачи использовались жесткие, гибкие или периодические граничные условия.

В работе была проведена апробация используемых потенциалов Морзе на адекватное описание теплового расширения. Полученные в модели значения температурного коэффициента линейного расширения оказались близки к справочным.

Таблица 1

Температурный коэффициент линейного расширения α металлов Ni, Cu, Al

Металл	Полученные в модели		Справочные данные [1]
	α (0-0,8T _{пл}), 10 ⁻⁶ K ⁻¹	α (0-100° C), 10 ⁻⁶ K ⁻¹	α (0-100° C), 10 ⁻⁶ K ⁻¹
Ni	12,2	11,8	13,3
Cu	15,6	15,1	17,0
Al	21,6	20,6	23,5

Третья глава диссертации посвящена исследованию основных механизмов самодиффузии, имеющих место в ГЦК кристаллах, находящихся в состоянии термодинамического равновесия. С целью определения вклада каждого из механизмов, осуществляющихся с участием точечных дефектов, в начале главы приводится расчет их равновесной концентрации в Ni, Cu и Al. Во второй части главы описываются результаты вычисления энергии миграции точечных дефектов и параметров различных механизмов диффузии. Делается оценка вклада основных механизмов в зависимости от температуры для Ni, Cu и Al

Чтобы определить равновесную концентрацию дефектов для заданной температуры необходимо иметь значения энтальпии ΔH^f и энтропии ΔS^f их образования.

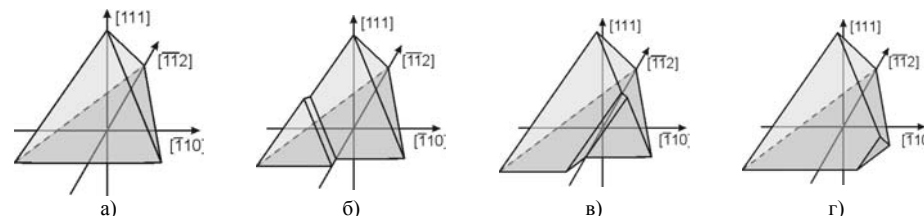


Рис.11. Основные этапы трансформации ТДУ при поглощении вакансий: а) $0 \div 2$ вакансий; б) $3 \div m/2$; в) $m/2 \div (m-4)$; г) $(m-3) \div m$. m – число атомных рядов на грани первоначального ТДУ

При исследовании механизмов миграции межузельного атома было выяснено, что он мигрирует посредством как минимум, двух механизмов: трансляционного смещения центра “тяжести” гантели на одно межатомное расстояние и вращения ее оси на 90° и краудионного механизма. Как видно из рис.12. траектория миграции межузельного атома содержит линейные участки, что характерно для краудионного механизма.

При объединении двух и более межузельных атомов наиболее энергетически выгодными в модели оказались конфигурации, состоящие из параллельных краудионов в направлении $\langle 110 \rangle$. Для кластеров, включающих до 4 внедрений, была характерна плоская краудионная конфигурация в плоскости $\{111\}$, а для 4-х и более объемная краудионная конфигурация. Миграция подобных кластеров происходила по краудионному механизму, при котором все краудионы, составляющие кластер, двигались одновременно вдоль одного направления $\langle 110 \rangle$.

Для кластеров межузельных атомов был проведен сравнительный анализ их стабильности. (Рассматривались плоские краудионные комплексы (ПКК), представляющие собой параллельные краудионы $\langle 110 \rangle$ в одной

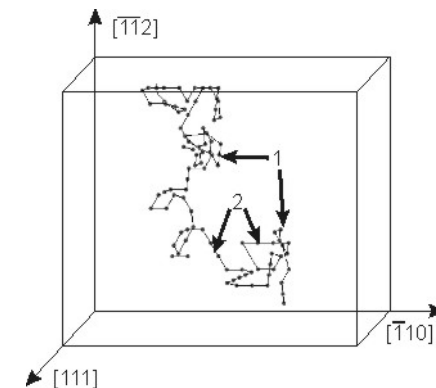


Рис.12. Траектория миграции межузельного атома в Ni при температуре 1040 К в течение 100 пс. 1 – механизм смещения и поворота гантели $\langle 100 \rangle$; 2 – краудионный механизм.

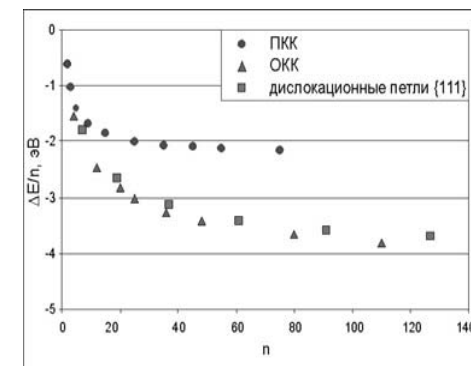


Рис.13. Зависимость величины $\Delta E/n$ от n для различных кластеров межузельных атомов в Ni.

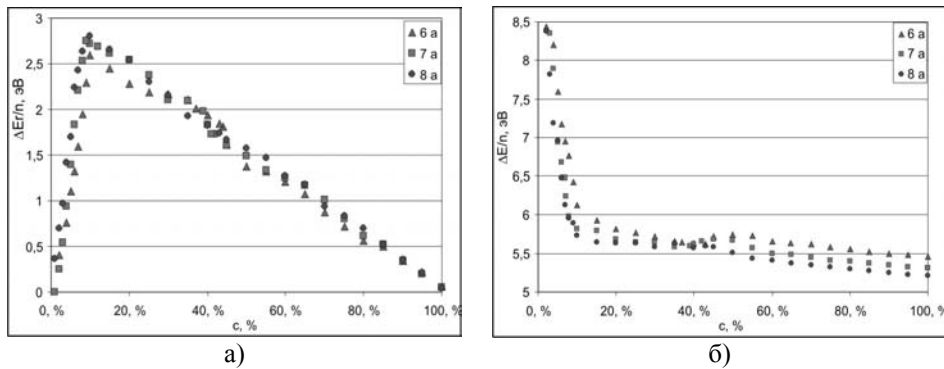


Рис.9. Зависимости величин $\Delta E_r/n$ (а) и $\Delta E/n$ (б) от концентрации вакансий c в обедненных зонах в Ni для трех различных диаметров $6a$, $7a$, $8a$.

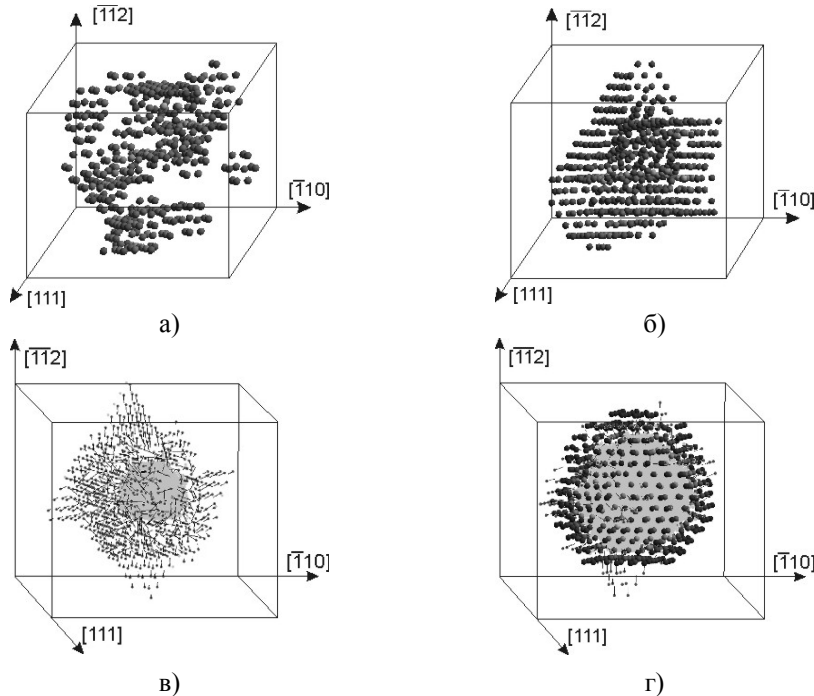


Рис.10. Основные варианты трансформации обедненных зон в процессе динамической релаксации при различной концентрации вакансий: а) 5% - комплекс вакансионных кластеров; б) 15% - образование смещений тетраэдрических групп атомов более чем в четырех направлениях; в) 45% - образование поры в центре обедненной зоны и смещений тетраэдрических групп атомов в восьми направлениях; г) 65% - вырождение ТДУ на фоне порообразования. Отрезки, демонстрирующие смещения атомов, увеличены в 5 раз. Серым цветом выделены поры

Для равновесной концентрации моновакансий в кристалле можно записать:

$$c_v = \frac{n_v}{N} = \exp\left(\frac{\Delta S_v^f}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H_v^f}{kT}\right), \quad (2)$$

где ΔH_v^f и ΔS_v^f - энтальпия и энтропия образования вакансии; n_v - количество вакансий в кристалле; N - число атомов в кристалле; k - постоянная Больцмана; T - температура.

Энтропия образования ΔS^f определялась через собственные частоты колебаний атомов в кристалле.

$$\Delta S^f = k \sum_{i=1}^{N'} \ln\left(\frac{\omega_{0i}}{\omega_i}\right) = k \sum_{i=1}^{N'} \ln\left(\frac{\tau_i}{\tau_0}\right), \quad (3)$$

где τ_i и τ_0 - период колебаний i -го атома и период колебаний атома в идеальном кристалле; ω_i и ω_0 - частота колебаний i -го атома и частота колебаний атома в идеальном кристалле; N' - число атомов, рассматриваемых при расчете энтропии ($N' \leq N$). Период колебаний атомов определялся по изменению модуля их скорости. В процессе компьютерного эксперимента для каждого атома вычислялось усредненное время между моментами, когда скорость атома после возрастания начинала падать, то есть усредненное значение полупериода колебаний $\tau_i/2$. По среднему значению полупериодов атомов в идеальном кристалле определялась величина $\tau_0/2$.

Энергия образования вакансии E_v^f - это минимальная работа по перемещению атома из центра кристалла на поверхность, то есть разность потенциальных энергий кристалла, содержащего вакансию, и идеального кристалла, но с тем же числом атомов N . Эту работу можно разложить на две составляющие: работу по удалению атома из кристалла на бесконечность и работу по добавлению одного атома на поверхность.

Выражение для энергии образования вакансии следующее:

$$E_v^f = (2E_s - E_r) - \zeta, \quad (4)$$

где E_s - энергия сублимации, приходящаяся на один атом металла, E_r - энергия, выделяющаяся при релаксации атомной структуры вблизи вакансии. ζ - минимальная работа, которую нужно затратить, чтобы удалить на бесконечность один атом с идеальной поверхности (то есть с излома ступени) при $T=0$ К, причем $\zeta > E_s$.

Наибольшая погрешность связана, как правило, с определением величины ζ . Ее можно получить из уравнения (4), подставив вместо энергии образования и энергии сублимации значения, найденные экспериментально. Но тем самым получается неточное, немного завышенное, значение ζ . Концентрация вакансий является эффективной величиной для вакансионных кластеров и задается соотношением

$$c_v = c_{1v} + 2c_{2v} + 3c_{3v} \dots = \sum_{n=1} n c_{nv}, \quad (5)$$

где c_{nv} – равновесная концентрация кластеров, состоящих из n вакансий. При этом чаще всего в литературе речь идет о бивакансиях, поскольку считается, что концентрация кластеров более высоких порядков ничтожно мала по сравнению с концентрацией моновакансий.

В работе для нахождения величины ζ было получено выражение учитывающее вклад кластеров n -го порядка:

$$\lambda_0 + \lambda_1 x + \lambda_2 x^2 + \lambda_3 x^3 + \dots + \lambda_n x^n = 0, \quad (6)$$

где $\lambda_0 = -\exp\left(-\frac{\Delta H_{\text{вак}}^f}{kT}\right)$; $\lambda_j = j \sum_{i=1}^{m_{jv}} \eta'_{jvi} \exp\left(\frac{\Delta S_{jvi}^f}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_{jvi}^r}{kT}\right)$; $x = \exp\left(\frac{\zeta}{kT}\right)$;

$\Delta H_{\text{вак}}^f$ – экспериментальное значение энтальпии образования вакансии; n – число рассматриваемых порядков вакансионных кластеров; j – порядок вакансионного кластера (число вакансий в кластере); m_{jv} – количество рассматриваемых конфигураций кластеров из j вакансий; η'_{jvi} – геометрический множитель для i -й конфигурации кластера из j вакансий (число возможных позиций дефекта в кристалле, приходящихся на один атом); ΔS_{jvi}^f – колебательная энтропия образования i -й конфигурации кластера из j вакансий; E_{jvi}^r – работа, совершаемая при удалении из кристалла на бесконечность j атомов в соответствии с i -й конфигурацией с учетом релаксации структуры.

С помощью формулы (6) и найденных значений ΔS_{jvi}^f и E_{jvi}^r были получены зависимости $\zeta(T)$. Уравнение (6) решалось относительно ζ методом подгонки. По зависимостям $\zeta(T)$ были определены средние значения ζ для Ni, Cu и Al. При этом были рассмотрены кластеры включающие до 8 вакансий. Кластеры, включающие более пяти вакансий, имели незначительный вес при расчете ζ .

В таблице 2 приведены значения величины ζ , полученные с помощью уравнения (4) (I метод) и с помощью уравнения (6), с учетом восьми первых порядков вакансионных кластеров (II метод). В таблице также приведены энергии образования вакансий, бивакансий и тривакансий полученные с помощью I и II методов и значения колебательной энтропии образования.

Расчет энергии образования межузельных атомов проводился по формуле

$$E_{ii}^f = E_{ii}^r + \zeta \quad (7)$$

где E_{ii}^r – работа, необходимая для помещения атома из бесконечности в соответствующее междоузлие (с учетом релаксации структуры вблизи дефекта) Результаты расчетов приведены в таблице 3. Следует отметить, что наиболее энергетически выгодной для всех рассмотренных металлов является гантельная конфигурация с осью вдоль направления $\langle 100 \rangle$, что согласуется с результатами

образом, часть свободного объема обедненной зоны шла на образование смещенных тетраэдрических групп атомов в восьми направлениях $\langle 111 \rangle$, а часть – на образование поры (рис.10в). При повышении концентрации вакансий все меньшую долю свободного объема содержали ТДУ и все большую поры. С повышением концентрации вакансий ТДУ имели менее выраженную форму, а при концентрациях в обедненной зоне выше 70% смещения тетраэдрических групп атомов не наблюдались вовсе.

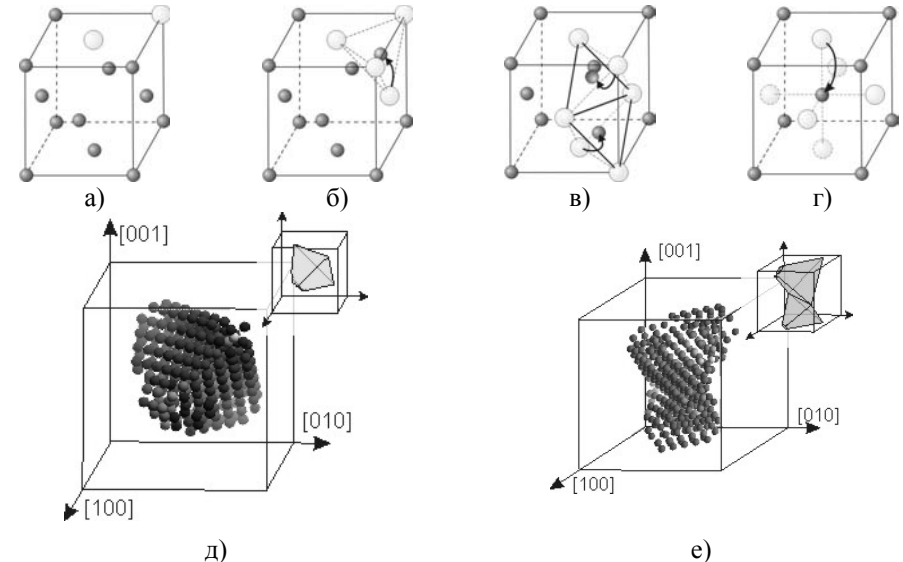


Рис. 8 Основные промежуточные конфигурации вакансионных кластеров при агрегатизации вакансий: а) бивакансия; б) объемная тривакансия; в) тетравакансия; г) пентавакансия. Большими светлыми шариками обозначены вакансии. Стрелками изображены направления смещений атомов из узлов решетки. Небольшой усеченный ТДУ (д) и двоянные ТДУ (е) показаны с помощью визуализатора распределения потенциальной энергии.

В результате исследований трансформации ТДУ при поглощении вакансий было выяснено, что рост ТДУ включает следующие стадии (рис.11): при поглощении идеальным ТДУ до двух вакансий существенной трансформации ТДУ не происходит – вакансии закрепляются на вершинных дислокациях и могут мигрировать вдоль них (рис.11а). В случае добавления от трех до $(m-4)$ вакансий, где m – число атомных рядов на грани ТДУ, на его грани образуется ступенька, которая в начальный момент роста имеет подъем со стороны вершины (рис.11б), а при достижении ею середины грани “меняет знак” и имеет со стороны вершины спуск (рис.11в). Когда число поглощенных вакансий находится в диапазоне от $(m-3)$ до m , ТДУ принимает форму тетраэдра с усеченной вершиной (рис.11г). При поглощении $(m+1)$ вакансии ТДУ становится идеальным.

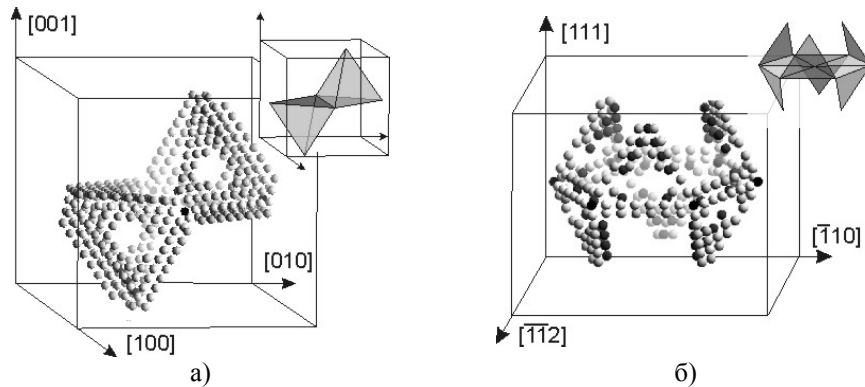


Рис.7 Трансформация плоских вакансионных дисков в Ni в комплексы ТДУ а) ромбической и б) гексагональной формы. Атомы с энергией близкой к энергии связи в идеальном кристалле не показаны.

В настоящей работе была исследована трансформация обедненных зон при низкотемпературной релаксации. Обедненные зоны в модели создавались в центре расчетного блока, содержащего 27000 атомов. В сферическую область диаметром d вводились вакансии, концентрация которых в данной области (обедненной зоне) варьировалась от 0 до 100%. Рассматривались обедненные зоны диаметром: $8a$, $7a$ и $6a$, где a – параметр решетки. После введения вакансий, проводилась динамическая релаксация структуры в течение 20–40 пс при начальной температуре 0 К. После релаксации рассчитывалась энергия $\Delta E_p/n$, выделившаяся в результате релаксации, и работа по удалению атомов из кристалла $\Delta E/n$ (n – число вакансий в обедненной зоне) в зависимости от концентрации вакансий в обедненных зонах (рис.9). Как видно, для всех рассматриваемых размеров имеются три характерных участка 0–10%, 10–40%, 40–100%.

При концентрациях вакансий меньше 10% внутри обедненной зоны вакансии объединялись в небольшие кластеры. При повышении концентрации размер ТДУ и доля вакансий в них увеличивались (рис.10а). При концентрации вакансий ~10% все вакансии объединялись, как правило, в один ТДУ. Механизм трансформации обедненных зон в ТДУ заключался в образовании согласованных смещений тетраэдрических групп атомов в направлениях $\langle 111 \rangle$ в область с избыточным свободным объемом.

При концентрации вакансий в обедненной зоне в диапазоне 10–40% сдвиги тетраэдрических групп атомов к центру обедненной зоны осуществлялись более чем в четырех направлениях типа $\langle 111 \rangle$. В результате этого конечный вакансионный кластер, как видно на (рис.10б), состоял из нескольких ТДУ, число которых не превышало восемь.

При достаточно высокой концентрации вакансий $\sim 40\%$, сдвиги тетраэдрических групп атомов в направлениях $\langle 111 \rangle$ были не способны при низких температурах полностью захлопнуть область с высокой долей свободного объема в центре обедненной зоны, и в ее центре происходило образование поры. Таким

других исследователей. Кроме того, гантель $\langle 111 \rangle$ оказалась нестабильной и без дополнительной активации перестраивалась в гантель $\langle 100 \rangle$.

Таблица 2
Энергия и энтропия образования вакансий, бивакансий и тривакансий в Ni, Cu и Al.

Металл	Метод	ζ , эВ	E_v^f , эВ		ΔS_v^f , к	бивакансии		тривакансии		
			модель	эксперимент [2, 3]		E_{2v}^f , эВ	ΔS_{2v}^f , к	конфигурация	E_{3v}^f , эВ	ΔS_{3v}^f , к
Ni	I (4)	6,883	1,640	$1,64_{-0,19}^{+0,16}$	0.4	2,446	0.7	прямая	3,116	0,7
								косая	3,338	1,0
								прямоугольная	2,803	0,75
	II (6)	6,419	2,104	$1,64_{-0,19}^{+0,16}$	0.4	3,374	0.7	объемная	1,947	0,7
								прямая	4,508	0,7
								косая	4,730	1,0
Cu	I (4)	5,509	1,220	$1,22_{-0,18}^{+0,09}$	0.35	1,787	0.6	прямоугольная	2,169	0,45
								объемная	1,368	0,45
								прямая	3,473	0,6
	II (6)	5,122	1,607	$1,22_{-0,18}^{+0,09}$	0.35	2,561	0.6	косая	3,683	0,9
								прямоугольная	2,529	0,45
								объемная	3,330	0,45
Al	I (4)	5,635	0,680	$0,68_{-0,06}^{+0,09}$	0.3	0,717	0.5	прямая	0,795	0,6
								косая	0,796	0,5
								прямоугольная	0,518	0,7
	II (6)	4,945	1,370	$0,68_{-0,06}^{+0,09}$	0.3	2,097	0.5	объемная	-0,173	0,3
								прямая	2,865	0,6
								косая	2,866	0,5
								прямоугольная	1,897	0,7
								объемная	2,588	0,3

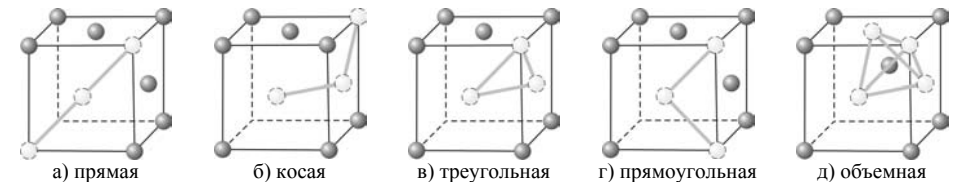


Рис.1 конфигурации тривакансий. (треугольная конфигурация нестабильна и переходит в объемную)

В работе рассматривались четыре механизма самодиффузии: вакансионный, скачок вакансии во вторую координационную сферу, бивакансионный, образование и рекомбинация динамических пар Френкеля. Циклические механизмы с одновременным смещением атомов не наблюдались в настоящей работе во всем диапазоне температур, поэтому не рассматривались.

Таблица 3

Энергетические характеристики межузельных атомов в ГЦК кристаллах Ni, Cu, Al

Металл	Конфигурация	E_i^r , эВ	E_i^f , эВ		E_i^f , эВ другие источники [3]	ΔS_i^f , к
			I метод	II метод		
Ni	Октаэдрическая	0,336	7,219	6,755	—	-0,8
	Тетраэдрическая	0,139	7,022	6,558	—	-1,0
	Краудион	0,292	7,175	6,711	4,10	-1,0
	Гантель <110>	0,314	7,197	6,733	—	-0,7
	Гантель <100>	-0,142	6,741	6,277	4,08	-0,7
	Гантель <111>	-0,142	—	—	4,24	—
Cu	Октаэдрическая	0,344	5,853	5,466	2,43÷6,09	-1,4
	Тетраэдрическая	0,581	6,090	5,703	3,70÷3,89	-1,0
	Краудион	0,341	5,850	5,463	4,84	-0,9
	Гантель <110>	0,393	5,902	5,515	—	-1,0
	Гантель <100>	0,002	5,511	5,124	2,19÷5,82	-0,9
	Гантель <111>	0,002	—	—	3,83÷5,27	—
Al	Октаэдрическая	-1,238	4,397	3,707	—	-0,4
	Тетраэдрическая	-0,739	4,896	4,206	—	-0,2
	Краудион	-0,972	4,663	3,973	—	-0,1
	Гантель <110>	-1,072	4,563	3,873	—	-0,3
	Гантель <100>	-1,551	4,084	3,394	2,89	-0,3
	Гантель <111>	-1,551	—	—	—	—

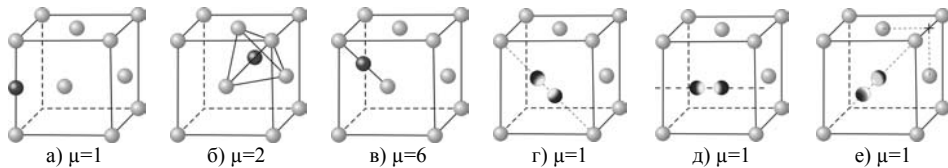
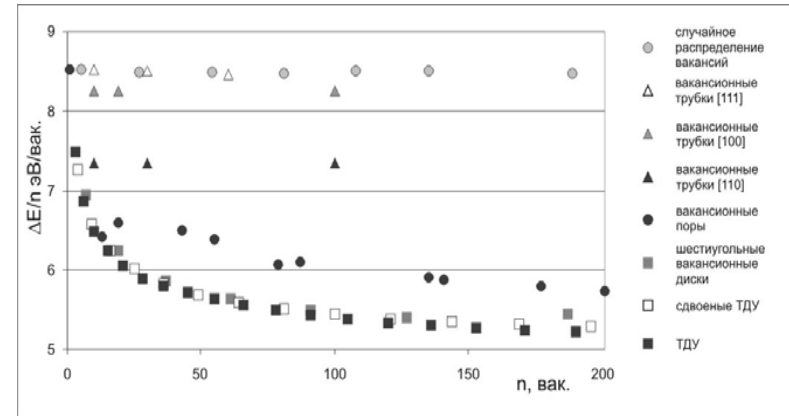


Рис.2 конфигурации межузельных атомов а) в октаэдрической поре; б) в тетраэдрической поре; в) краудион; г) гантель с осью вдоль <110>; д) гантель с осью вдоль <100> е) гантель с осью вдоль <111>

Энергия миграции вакансии в молекулярно-динамической модели определялась двумя способами: статическим и динамическим. Статическим методом, определялась величина энергетического барьера на пути миграции вакансии из одного узла в другой. Для определения энергии миграции вакансии во вторую координационную сферу использовалась аналогичная методика.

Динамический способ позволяет определить и энергию миграции, и предэкспоненциальный множитель. Он заключается в нахождении зависимости коэффициента диффузии от температуры при введении в расчетный блок одного дефекта рассматриваемого типа. Энергия миграции бивакансий и межузельных атомов определялась только динамическим способом.

Найденные энергии миграции для вакансий, бивакансий и межузельных атомов представлены в таблицах 4 и 5. Механизм, заключающийся в миграции вакансий сразу во вторую координационную сферу, согласно полученным результатам, практически не вносит вклад в общий процесс самодиффузии.

Рис.5. Зависимость величины $\Delta E/n$ от n для различных вакансионных кластеров в Ni.

Наиболее простой механизм образования ТДУ заключался в перестройке вакансионного диска треугольной формы в плоскости {111}. Без дополнительной активации происходило последовательное смещение (оседание) групп атомов, имеющих форму правильных треугольников, из плоскостей, параллельных плоскости вакансионного диска, по направлению к нему.

Помимо вакансионных дисков треугольной формы, в настоящей работе были рассмотрены вакансионные диски ромбической и шестиугольной форм в плоскости {111}. Было выяснено, что при данных размерах они все нестабильны и даже при отсутствии термоактивации трансформировались в комплексы, состоящие из различного числа ТДУ (рис.7). Ромбический вакансионный диск перестраивался в сдвоенные ТДУ. Шестиугольный вакансионный диск трансформировался в комплекс из шести ТДУ.

Случайно распределенные вакансии за относительно небольшие промежутки времени $\approx 150-200$ пс объединялись в небольшие кластеры, основные виды которых представлены на рис.8. При длительном высокотемпературном отжиге отдельные малые вакансионные кластеры объединялись в один или несколько ТДУ.

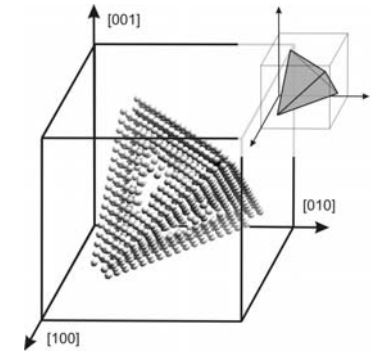


Рис.6. Распределение потенциальной энергии в Ni содержащем правильный ТДУ. Атомы с энергией близкой к энергии связи в идеальном кристалле не показаны.

В таблице 8 приведены значения скоростей распространения продольных и поперечных волн, найденные в настоящей работе, справочные значения и значения полученные с помощью теоретических расчетов.

Таблица 8

Молекулярно-динамические, справочные и теоретические значения скоростей распространения продольных и поперечных волн в Ni, Cu и Al, м/с.

Металл	Продольные волны					Поперечные волны		
	Направление <110>		Направление <100>		экспер.[6]	Модель	теор.	экспер.[6]
	Модель	теор.	Модель	теор.				
Ni	6230	6136	5600	5397	5630	2260	2481	2960
Cu	5230	5076	4730	4420	4700	1930	1687	2260
Al	7040	6618	6490	6467	6260	2450	3096	3080

Для изучения агрегатизации вакансий в расчетный блок кристалла вводились вакансии, концентрация которых варьировалась от 0,1 до 30%. Для выяснения стабильности кластеров проводились молекулярно-динамические отжиги при температурах от $0,5 \cdot T_{пл}$ до $T_{пл}$ в течение 100-500 пс с последующим охлаждением до температуры близкой к 0 К. После охлаждения рассчитывалась потенциальная энергия расчетного блока, проводилось изучение структуры и механизмов структурных перестроек с помощью визуализаторов распределения потенциальной энергии и атомных смещений.

После создания стартовой конфигурации расчетных блоков перед проведением молекулярно-динамических отжигов для каждого рассматриваемого вакансионного кластера была также рассчитана работа ΔE , которую необходимо затратить на удаление соответствующих атомов из расчетного блока на бесконечность, чтобы в кристалле образовался рассматриваемый кластер с учетом релаксации структуры.

На рис.5 изображена зависимость величины $\Delta E/n$ от n , где n – число вакансий в кластере, для различных вакансионных кластеров в Ni. Наиболее энергетически выгодными, как показала модель, являются тетраэдры дефектов упаковки (ТДУ). ТДУ правильной формы (рис.6) в молекулярно-динамической модели образовывались при перестройке вакансионного диска треугольной формы или при объединении вакансий, из числа которых можно создать правильный ТДУ. Грани ТДУ ориентированы вдоль плоскостей типа $\{111\}$ и являются дефектами упаковки, а ребра ориентированы вдоль направлений $\langle 110 \rangle$ и представляют собой вершинные дислокации.

Экспериментально ТДУ, как правило, наблюдаются в металлах, имеющих невысокую энергию дефекта упаковки (Au, Ag, Cu, Ni-Co и т.д.) [7]. Например, в Au вакансионные диски наблюдаются только выше определенного размера - 230 Å, в то время как – до размера 200 Å преобладают ТДУ [7].

Таблица 4

Энергия миграции вакансии в первую и во вторую координационные сферы в Ni, Cu, Al.

	вакансионный					вакансия во 2 к.сф.
	E_v^m , эВ	E_v^m , эВ	$D'_{ov} N$, м2/с	E_v^m , эВ	D'_{ov} , м2/с	E_v^m , эВ
	статич.	динамический		справочн.[3]	справочн.[4, 5]	статич.
Ni	0,849	0,855	$0,5 \cdot 10^{-6}$	$0,92 \pm 1,46$	$0,6 \div 9,9 \cdot 10^{-4}$	5,579
Cu	0,713	0,715	$1,1 \cdot 10^{-6}$	$0,67 \div 1,06$	$0,1 \div 2,1 \cdot 10^{-4}$	4,436
Al	0,390	0,375	$0,9 \cdot 10^{-6}$	$0,57 \div 0,65$	$0,1 \div 2,3 \cdot 10^{-4}$	3,059

Таблица 5

Энергия миграции бивакансии и межузельного атома, определенная динамическим методом, в Ni, Cu, Al

	бивакансия		межузельный атом		
	E_{2v}^m , эВ	$D'_{o2v} N$, м2/с	E_{iv}^m , эВ	$D'_{ov} N$, м2/с	E_i^m , эВ другие работы [3]
Ni	0,171	$2,19 \cdot 10^{-8}$	0,087	$4,35 \cdot 10^{-8}$	$0,04 \div 0,15$
Cu	0,149	$2,73 \cdot 10^{-8}$	0,064	$3,44 \cdot 10^{-8}$	$0,05 \div 0,57$
Al	0,079	$2,01 \cdot 10^{-8}$	0,015	$2,91 \cdot 10^{-8}$	$0,11 \div 0,15$

Для сравнения вклада отдельных механизмов самодиффузии были найдены математические выражения для коэффициентов диффузии, протекающей по рассматриваемым механизмам.

Для вакансионного механизма:

$$D_v = D'_{ov} N \exp\left(\frac{\Delta S_v^f}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_v^f + E_v^m}{kT}\right), \quad (8)$$

для бивакансионного механизма:

$$D_{2v} = D'_{o2v} N \frac{\eta_1}{2} \exp\left(\frac{\Delta S_{2v}^f}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_{2v}^f + E_{2v}^m}{kT}\right) \quad (9)$$

где D'_{ov} и D'_{o2v} – предэкспоненциальный множитель, получаемый из экспериментальной зависимости $\ln D(T^{-1})$ для вакансий и бивакансий соответственно при введении единственного дефекта в расчетный блок; η_1 – число атомов в первой координационной сфере ($\eta_1=12$).

Если допустить, что миграции вакансии и межузельного атома при образовании и рекомбинации пары Френкеля происходят независимо, то для коэффициента диффузии по данному механизму можно записать

$$D_f = \left[D'_{ov} N \exp\left(-\frac{E_v^m}{kT}\right) + D'_{oi} N \exp\left(-\frac{E_i^m}{kT}\right) \right] \times \sum_{i=1}^5 \sqrt{\mu_i} \exp\left(\frac{\Delta S_v^f + \Delta S_{ii}^f}{2k}\right) \exp\left(-\frac{E_v^r + E_{ii}^r}{2kT}\right) \quad (10)$$

где D'_{oi} – предэкспоненциальный множитель, получаемый из экспериментальной зависимости $\ln D(T^{-1})$ при введении в расчетный блок единственного межузельного атома; η_l – геометрический множитель (рис.2).

Суммарный коэффициент диффузии определялся как сумма коэффициентов диффузии по вакансионному, бивакансионному механизмам и по механизму, заключающемуся в образовании и рекомбинации пар Френкеля:

$$D_{\Sigma} = D_v + D_{2v} + D_f \quad (11)$$

В таблице 6 приведены полученные в модели энергия активации и предэкспоненциальный множитель суммарной самодиффузии. В табл.7 приведены вклады в общий процесс самодиффузии миграции бивакансий, а также образования и рекомбинации пар Френкеля. Наибольший вклад, согласно результатам, полученным с помощью I, и II метода, после вакансионного вносит механизм миграции бивакансий. Механизм, заключающийся в образовании и рекомбинации пар Френкеля, вносил существенно меньший вклад, ничтожно малый по сравнению с вкладом вакансионного механизма.

Таблица 6

Параметры самодиффузии в Ni, Cu, Al (Q – энергия активации).

	полученные в модели				справочные [4, 5]		теоретические [2] $D_0, \text{м}^2/\text{с}$ для всех металлов
	$QI, \text{эВ}$	$D_{0I}, \text{м}^2/\text{с}$	$QII, \text{эВ}$	$D_{0II}, \text{м}^2/\text{с}$	$Q, \text{эВ}$	$D_0, \text{м}^2/\text{с}$	
Ni	2,501	$0,9 \cdot 10^{-6}$	2,954	$0,8 \cdot 10^{-6}$	$2,62 \pm 3,04$	$0,6 \div 9,9 \cdot 10^{-4}$	$0,2 \div 1,5 \cdot 10^{-6}$
Cu	1,933	$2,0 \cdot 10^{-6}$	2,321	$1,7 \cdot 10^{-6}$	$2,04 \pm 2,20$	$0,1 \div 2,1 \cdot 10^{-4}$	
Al	0,810	$0,3 \cdot 10^{-6}$	1,760	$1,2 \cdot 10^{-6}$	$1,33 \pm 1,50$	$0,1 \div 2,3 \cdot 10^{-4}$	

Таблица 7

Вклад в самодиффузию миграции бивакансий, а также образования и рекомбинации пар Френкеля при температуре плавления в Ni, Cu, Al.

	I метод		II метод	
	D_{2v}/D_{Σ}	D_f/D_{Σ}	D_{2v}/D_{Σ}	D_f/D_{Σ}
Ni	0,130	$6,66 \cdot 10^{-7}$	$6,55 \cdot 10^{-3}$	$1,71 \cdot 10^{-5}$
Cu	0,149	$8,64 \cdot 10^{-8}$	$6,37 \cdot 10^{-3}$	$2,76 \cdot 10^{-6}$
Al	0,832	$4,49 \cdot 10^{-10}$	$9,25 \cdot 10^{-4}$	$1,42 \cdot 10^{-5}$

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию динамики атомной структуры в радиационно поврежденных металлах. В первой части главы приводятся результаты исследования распространения локально инициированных упругих волн в ГЦК кристаллах. Во второй части приводятся результаты исследований агрегатизации вакансий и межузельных атомов, рассматриваются механизмы роста и трансформации субмикроскопических кластеров точечных дефектов, механизмы их миграции.

Локальная инициация упругих волн осуществлялась сообщением импульса одному атому, находящемуся в центре расчетного блока. При этом варьировались величина и направление импульса. Чтобы исключить влияние тепловых колеба-

ний исследования проводились при температуре 0 К. В ходе экспериментов проводилась регистрация как продольных так и поперечных волн.

Фронт продольной волны, как видно на (рис.3), в связи с анизотропией скорости распространения, имел форму усеченного куба, грани которого представляли семейство плоскостей $\{100\}$. Фронт поперечных волн состоял из пар симметрично расходящихся от места инициации и увеличивающихся в размере эллипсообразных выпуклых поверхностей-фронтов. Схематичное изображение одной из таких пар приведено на рис.4. Распространение подобных эллипсообразных фронтов в ГЦК металлах происходило только в направлениях типа $\langle 110 \rangle$. Число расходящихся пар фронтов поперечных волн зависело от направления первоначального импульса: пара фронтов возникала, если проекция первоначального импульса на соответствующее направление типа $\langle 110 \rangle$ была ненулевой, при этом распространение происходило перпендикулярно данному направлению. Всего в молекулярно-динамических экспериментах одновременно наблюдалось от трех (с импульсом $\langle 111 \rangle$) до пяти (с импульсом $\langle 110 \rangle$) таких пар фронтов. Поперечные волны, как показали исследования, всегда служили источником вторичных продольных волн.

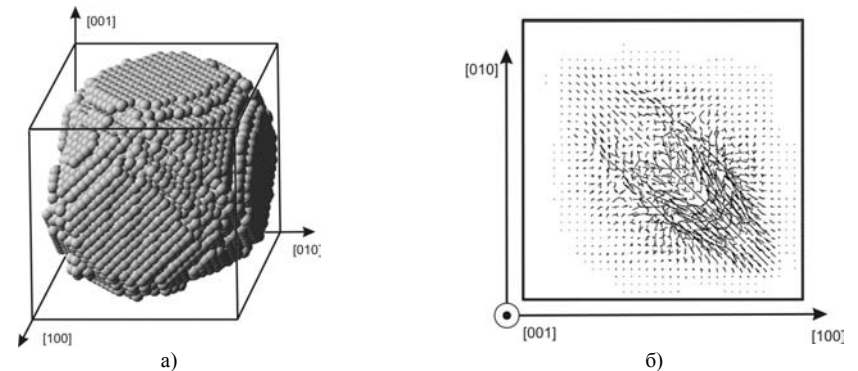


Рис.3. Форма фронта продольной и поперечной волны. Показаны атомы, находящиеся на фронте продольной волны.

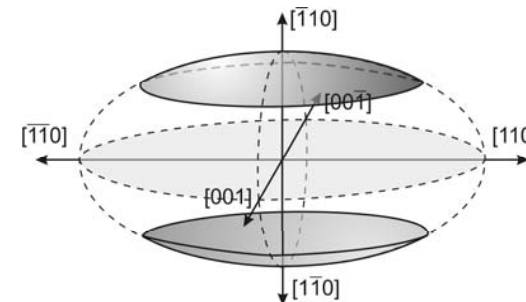


Рис.4. Схематичное изображение пары эллипсообразных фронтов поперечной волны (серая закрашенная область). При инициирующем импульсе в направлении $[110]$ данная пара фронтов расходит в противоположные стороны перпендикулярно направлению импульса