

*На правах рукописи*



МАРКИДОНОВ АРТЕМ ВЛАДИМИРОВИЧ

**БЕЗДИФФУЗИОННЫЙ МЕХАНИЗМ МАССОПЕРЕНОСА В  
КРИСТАЛЛАХ, СОДЕРЖАЩИХ АГРЕГАТЫ ВАКАНСИЙ И  
МЕЖУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ**

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Барнаул - 2009

Работа выполнена в Алтайском государственном техническом университете им. И.И.Ползунова и Кузбасской государственной педагогической академии

Научный руководитель: заслуженный деятель науки РФ,  
доктор физико-математических наук,  
профессор Старостенков М.Д.

Официальные  
оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор Попов В.А.  
доктор физико-математических наук,  
профессор Шаркеев Ю.П.

Ведущая организация: Кемеровский государственный университет

Защита состоится "\_\_\_"\_\_\_\_\_ 2009 г. в \_\_\_ час. на заседании диссертационного совета Д212.004.04 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 "\_\_\_"\_\_\_\_\_ 2009 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
кандидат физико-математических наук



Романенко В.В.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организаций, просим посылать в 2-х экземплярах на адрес университета.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность проблемы.** Точечные дефекты играют важнейшую роль в структурно-энергетических изменениях, происходящих в материалах при внешних высокоэнергетических воздействиях. К простейшим точечным дефектам относятся вакансии и межузельные атомы. Данные дефекты могут возникать в кристаллической решетке в результате внешнего высокоинтенсивного воздействия, например при ионной имплантации.

При образовании вакансий и межузельных атомов, структура кристаллической решетки вблизи них искажается за счет смещений атомов в упругих полях дефектов, что вызывает локальное нарушение плотности. В процессе структурной релаксации большая часть точечных дефектов аннигилирует, и при этом «идеальная» плотность кристалла восстанавливается. Подобные процессы, связанные с перемещением вещества внутри некоей системы, принято называть массопереносом.

Аннигиляция точечных дефектов, особенно на близких расстояниях между вакансией и межузельным атомом, происходит со столь высокой скоростью, что не позволяет экспериментально исследовать такие процессы, особенно в металлических материалах. Поэтому в данном случае актуальным является использование метода компьютерного моделирования.

Компьютерное моделирование, являющееся в настоящее время таким же признанным методом исследования как экспериментальный и теоретический метод, начало применяться в физике твердого тела с конца пятидесятих годов XX в. С его помощью на атомном уровне возможно исследование не только быстропротекающих процессов, как, например, аннигиляция точечных дефектов, но и процессов более длительных по времени. При помощи компьютерной модели можно проверить теоретические разработки, объяснить и спрогнозировать явления еще не освещенные в полной мере другими методами исследования.

В данной работе компьютерное моделирование проводилось по методу молекулярной динамики. Исследование релаксационных процессов в кристаллах, содержащих точечные дефекты, проводилось на двумерной и объемной модели металлов с ГЦК решеткой.

**Цель настоящей работы** заключается в исследовании методом компьютерного моделирования релаксационных процессов и механизмов массопереноса в ГЦК кристаллах содержащих одиночные точечные дефекты, а также их комплексы.

Решение поставленной задачи в данной работе, подразумевает несколько этапов:

1. Построение дву- и трехмерной молекулярно-динамической модели для исследования на атомном уровне релакса-

ционных процессов в различных ГЦК металлах содержащих точечные дефекты. Построение расчетных блоков содержащих одиночные точечные дефекты и их комплексы.

2. Изучение атомных смещений вблизи одиночных дефектов и их комплексов на начальной стадии процесса релаксации.

3. Изучение процессов аннигиляции одиночных пар Френкеля в зависимости от расстояния между составными частями пары и их разориентации относительно друг друга. Изучение процессов аннигиляции комплексов точечных дефектов.

4. Выявление механизмов массопереноса, и оценка скорости данного процесса.

5. Исследование влияния начальной температуры расчетного блока и всесторонней деформации на релаксационные процессы в кристалле, содержащем точечные дефекты.

**Научная новизна** работы заключается в том, что при помощи метода молекулярной динамики впервые были тщательно исследованы начальные и последующие процессы релаксации кристаллической структуры при импульсном введении точечных дефектов. Показан механизм, по которому осуществляется аннигиляция одиночной пары Френкеля, а также двух комплексов точечных дефектов, представляющих собой дислокационные петли вакансионного и межузельного типа. Также впервые измерена скорость переноса массы происходящего в процессе структурной релаксации кристалла.

**Научная и практическая ценность диссертационной работы** заключается в возможности использовании развитых представлений в радиационном материаловедении с целью создания новых материалов с заданными свойствами, а также с усовершенствованием свойств уже известных материалов подвергающихся различным экстремальным воздействиям в процессе эксплуатации. Кроме этого, результаты компьютерного моделирования могут быть использованы как демонстрационный материал, отображающий процессы, протекающие в кристаллических структурах, полезный для студентов, осваивающих курс физики.

**На защиту выносятся следующие положения:**

1. Процесс релаксации кристаллической структуры, содержащей точечные дефекты, состоит из нескольких стадий: образование ударной волны, с последующей ее трансформацией в продольную звуковую волну, и возникновение эстафетных атомных смещений, приводящих к аннигиляции точечных дефектов.

2. Механизмы аннигиляции одиночной пары Френкеля и дефектов, сгруппированных в ряды, различны. В первом случае инициатором эстафетных смещений является межузельный атом, приближившейся к вакансии на критическое расстояние, а во втором случае – продольная волна, порожденная рядом межузельных атомов.

3. Скорость передачи атомами импульса при эстафетных смещениях, или, что то же самое, скорость массопереноса, может превышать скорость звука.

**Апробация работы.** Результаты работы были доложены и обсуждены на следующих научных конференциях:

– Всероссийская научно-практическая конференция «Наука в ВУЗе: современные тенденции», Новокузнецк, Россия, 2007;

– IV Международная школа-конференция «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений» (MPFP), Тамбов, Россия, 24 - 30 июня 2007 г;

– V Международная научная школа-конференция «Фундаментальное и прикладное материаловедение», Барнаул, Россия, 2007 г;

– X Международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Бийск, Россия, 8 - 12 сентября 2008 г;

– V Международная научно-техническая школа-конференция «Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию» (Молодые ученые - 2008), Москва, Россия, 10 - 13 ноября 2008 г;

– IX Молодежная школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС - 9), Екатеринбург, Россия, 17 - 23 ноября 2008 г;

– Всероссийская конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации», Новосибирск, Россия, 4 - 7 декабря 2008 г;

– Первая международная школа-семинар по фундаментальным проблемам микро- и наносистемной техники (MNST'2008), Новосибирск, Россия, 10 - 13 декабря 2008 г;

– XV Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ - 15), Кемерово - Томск, Россия, 26 марта - 2 апреля 2009 г;

– Вторая всероссийская конференция с международным Интернет – участием «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к Наноиндустрии», Ижевск, Россия, 8 - 10 апреля 2009 г;

– XV Международная научно-практическая конференция студентов и молодых ученых «Современная техника и технологии», Томск, Россия, 4 - 8 мая 2009 г;

– Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии», Витебск, Беларусь, 25 - 29 мая 2009 г;

– Первая региональная научно-практическая конференция «Наноиндустрия Алтая 2009», Бийск, Россия, 2009 г;

– XVII Международная конференция «Физика прочности и пластичности материалов», Самара, Россия, 23 - 25 июня 2009 г;

– Всероссийская конференция с элементами научной школы для молодежи «Новые материалы. Создание, структура, свойства - 2009», Томск, Россия, 8 - 11 сентября 2009 г;

– VI Международная научная школа-конференция «Фундаментальное и прикладное материаловедение», Барнаул, Россия, 16 - 18 сентября 2009 г;

– Третья международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов», Москва, Россия, 12 - 15 октября 2009 г;

– Всероссийская научно-техническая конференция с международным участием «Ультрадисперсные порошки, наноструктуры, материалы», Красноярск, Россия, 15 - 16 октября 2009 г.

**Публикации.** Результаты работы опубликованы в 14 статьях, две из которых в журналах, включенных в список ВАКа для публикации материалов диссертационных работ, и в 9 тезисах докладов.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 210 наименований. Работа изложена на 226 страницах машинописного текста, содержит 4 таблицы и 123 рисунка.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность и практическая ценность выбранного направления исследований. Сформулирована цель диссертационной работы, описана научная новизна, практическая значимость. Приведены основные защищаемые положения и краткое содержание работы по главам.

**В первой главе** приведен обзор современных представлений о точечных дефектах, их образовании и влияния на свойства реальных твердых тел. В первом разделе главы подробно рассмотрены простейшие точечные дефекты – вакансии и межузельные атомы. Уделено внимание работам, в которых проведено исследование комплексов точечных дефектов.

Во втором разделе рассматриваются радиационные дефекты. Интерес к таким дефектам вызван тем, что при радиационном облучении материала образуется высокая концентрация не только вакансий, но и межузельных атомов. Приводятся результаты работ по исследованию пар Френкеля и образования точечными дефектами различных устойчивых комплексов. Отмечено, что значительная часть исследований проблемы образования и последующей эволюции дефектной кристаллической структуры проведена при помощи компьютерного моделирования.

Третий раздел главы посвящен описанию основных этапов построения компьютерной модели и имеющихся на сегодняшний день методов компьютерного моделирования.

В конце главы, с учетом приведенного обзора, сформулированы задачи исследования.

**Во второй главе** описывается построение компьютерной модели используемой в данной работе. В первом разделе главы рассматриваются этапы проведения эксперимента по методу молекулярной динамики и основные требования, предъявляемые к компьютерной модели. Начальный этап эксперимента представляет собой процесс конструирования расчетного блока. Следующий этап, являющийся основным в молекулярно-динамическом моделировании, заключается в определении траекторий движения атомов. На третьем этапе осуществляется наблюдение за различными характеристиками, например, температурой или потенциальной энергией, а также расчет требуемых величин и построение графиков. К основным требованиям, предъявляемым к компьютерной модели, относятся реалистичность потенциала межатомного взаимодействия, скорость выполнения расчетов, погрешность расчетов, а также наглядность визуализаторов расчетного блока.

Следующий раздел главы посвящен описанию выбранного метода компьютерного моделирования и потенциальной функции межатомного взаимодействия применяемых при решении поставленных задач. Сущность метода молекулярной динамики заключается в том, что поведение заданной совокупности атомов описывается в рамках классической механики системой обыкновенных дифференциальных уравнений движения Ньютона. Система уравнений решается с помощью численных методов интегрирования дифференциальных уравнений. Температура расчетной ячейки задается через начальные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла. При этом начальные скорости атомов задаются равными по абсолютной величине, но со случайными направлениями. Полная кинетическая энергия соответствует заданной температуре, а суммарный импульс расчетной ячейки должен быть равен нулю.

Нахождение потенциальной функции, которая бы наиболее корректно описывала межатомное взаимодействие, является важнейшей задачей компьютерного моделирования в физике конденсированных сред. Обычно приходится выбирать между точностью потенциальной функции и ее простотой, так как от этих условий зависит скорость выполнения расчетов и их достоверность. В настоящей работе межатомное взаимодействие задавалось парным центральным потенциалом Морзе:

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

где  $D$  – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы,  $\alpha$  – параметр, определяющий жесткость межатомных связей,  $\beta = e^{\alpha \cdot r_0}$ ,  $r_0$  – некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами.

В третьем разделе описаны используемые в работе визуализаторы атомной структуры. При исследовании наиболее часто применялся визуализатор атомных смещений, с помощью которого можно продемонстрировать положение атомов в определенный момент времени относительно начального положения. Смещение атомов изображается в виде отрезков, длина которых зависит от выбранного масштаба. В случае если масштаб смещений равняется единице, то отрезки соединяют начальное и конечное положение атомов. При увеличении же масштаба появляется возможность проанализировать достаточно малые атомные смещения.

Также в работе использовался визуализатор атомных рядов, представляющий собой линии соединяющие атомы вдоль плотноупакованных направлений. Стоит отметить, что применение последнего визуализатора при проведении исследований на трехмерной модели затруднительно в связи со сложностью и меньшей наглядностью трехмерной структуры. Поэтому в данном случае использовался лишь визуализатор атомных смещений, причем в ряде экспериментов применялось обрезание смещений для того, чтобы не загромождать картинку.

**В третьей главе** изучается процесс релаксации структуры содержащей точечные дефекты представляющие собой пару Френкеля, с последующей их аннигиляцией. Первый раздел посвящен изучению возникновения и распространения продольной волны, порожденной одиночным точечным дефектом. Так при импульсном введении в кристаллическую структуру одиночного межузельного атома в самом начале процесса релаксации возникают равные по величине ударные смещения трех атомов вдоль направлений типа  $\langle 112 \rangle$  в параметрах кристаллографии объемной ГЦК решетки под углами в  $2\pi/3$  друг к другу (см. рис. 1.а).

Величина этих смещений в случае расчетного блока моделирующего чистый алюминий составляет примерно 0.042 нм. Максимального смещения – 0.052 нм – атомы достигают к 0.02 пс эксперимента, вызывая при этом вторичные смещения группы из шести атомов. В дальнейшем величина смещений первой тройки атомов неуклонно падает и к 0.06 пс эксперимента атомы начинают смещаться в противоположную сторону. Зависимость смещений атомов первой группы от времени эксперимента представлена на рисунке 2.



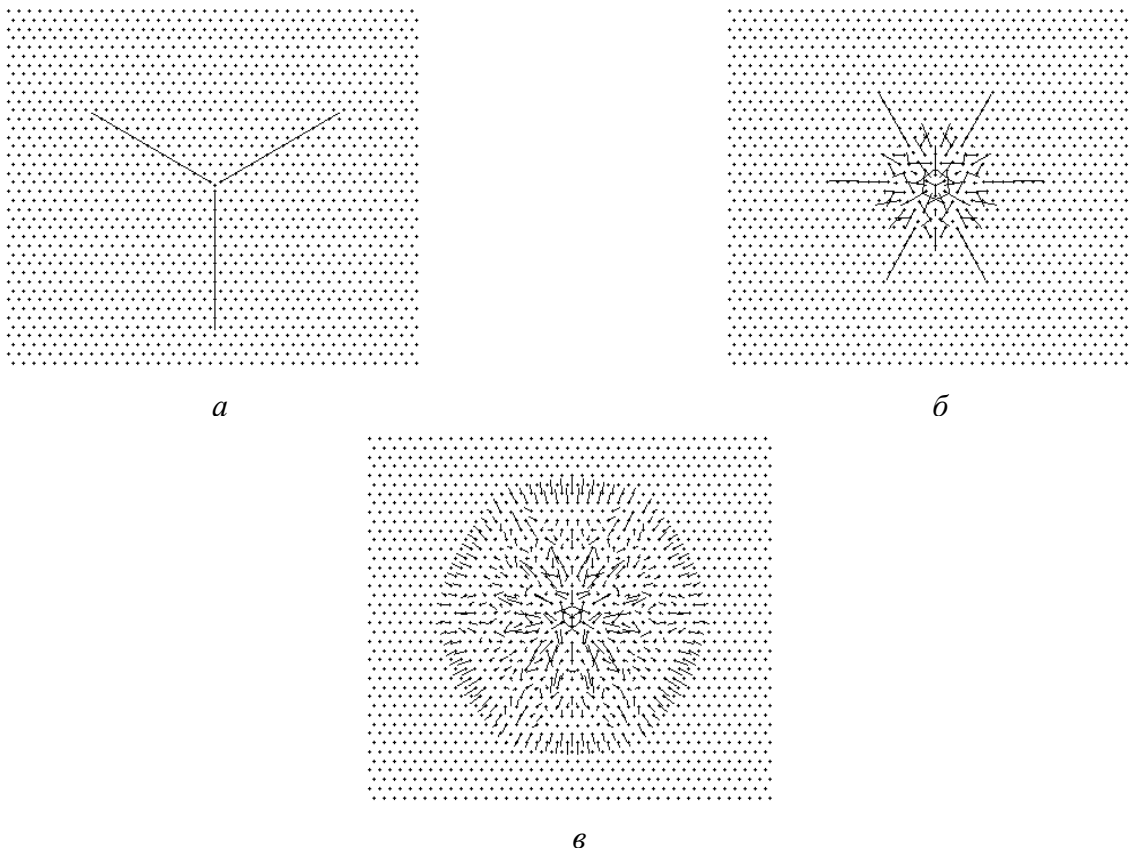


Рис.1. Картины атомных смещений для расчетного блока с одиночным межузельным атомом через 0.01 (а), 0.15 (б) и 0.50 (в) пс эксперимента. Смещения увеличены в 100 раз.

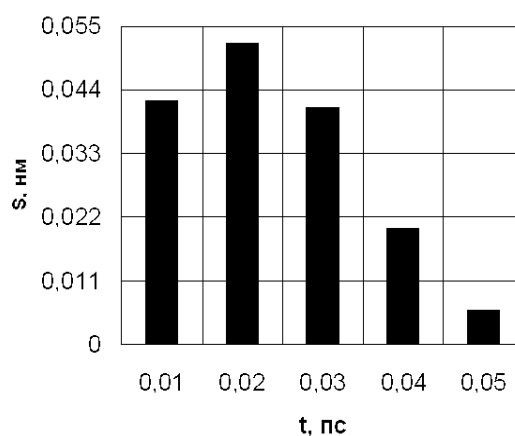


Рис.2. Временная зависимость смещений атомов первой группы в поле межузельного атома.

Наибольшие смещения атомов второй группы примерно в полтора раза меньше аналогичных смещений атомов первой группы. В свою очередь они порождают смещения следующей группы атомов с меньшими амплитудами. Атомы этой группы начинают смещаться преимущественно вдоль плотноупакованных направлений типа  $\langle 110 \rangle$ ,

где наблюдаются наибольшие амплитуды (см. рис.1.б). Подобные смещения формируют ударную волну, распространяющуюся в кристалле с постепенным затуханием, и трансформирующуюся в продольную звуковую волну (см. рис.1.в).

Введение одиночной вакансии приводит к смещениям шести соседних с ней атомов примерно на  $0.9 \cdot 10^{-3}$  нм по направлению к центру дефекта (см. рис. 3.а). Данные смещения распространяются вдоль плотноупакованных направлений типа  $\langle 110 \rangle$ . Амплитуда смещений первых шести атомов продолжает расти вплоть до 0.05 пс эксперимента (рис.4), а затем смещения начинают уменьшаться и после 0.10 пс эксперимента атомы возвращаются в исходные положения. Помимо того, что первые шесть атомов смещаются по направлению к вакансии, еще шесть атомов второго окружения смещаются в противоположном направлении на величину примерно в три раза меньшую. Подобные смещения формируют ударную, а затем продольную волну (рис.3.б).

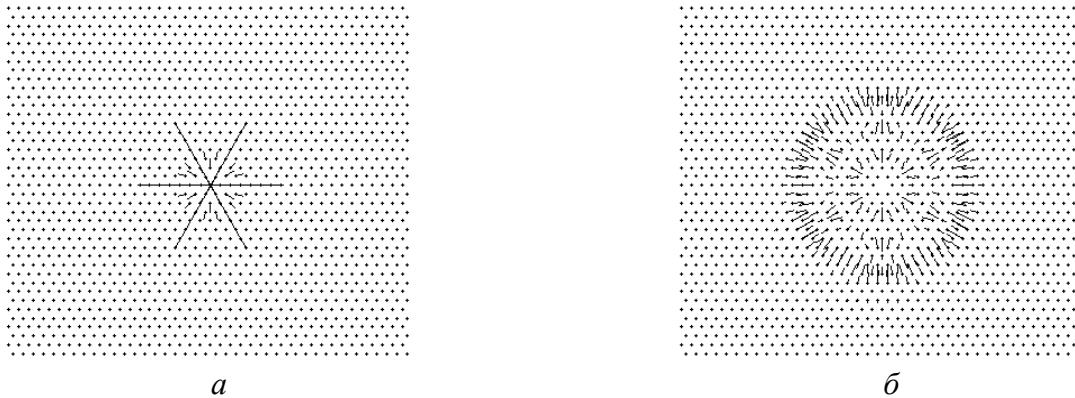


Рис.3. Картины атомных смещений для расчетного блока с одиночной вакансией в моменты времени 0.05 (а) и 0.50 (б) пс эксперимента. Смещения увеличены в 1000 раз.

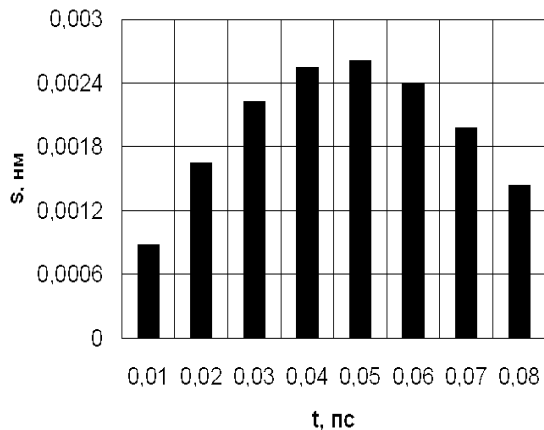


Рис.4. Временная зависимость смещений атомов первой группы в поле вакансии.

Стоит отметить, что величины смещений атомов в упругих полях дефектов в начале процесса релаксации отличаются у разных ГЦК металлов. Они уменьшаются от металла с меньшей атомной массой к металлу с большей массой.

Таким образом, процесс релаксации кристаллической структуры содержащей точечные дефекты на начальном этапе представляет собой возникновение ударной волны, с последующей ее трансформацией в продольную звуковую волну. Измерения показали, что волны, порожденные разными дефектами, движутся с различной скоростью. Скорость волны порожденной межузельным атомом, изначально имеет большее значение, по сравнению с аналогичной волной образующейся при введении вакансии.

Во втором разделе данной главы изучается процесс аннигиляции дефектов образующих пару Френкеля в зависимости от расстояния между ними и угла взаимной разориентации. В расчетный блок вдоль плотноупакованного направления вводилась пара точечных дефектов на расстояниях от пяти до восьми межатомных расстояний. В конце процесса релаксации с помощью визуализатора атомных смещений наблюдались прямые траектории смещений атомов от межузельного атома к вакансии. Время аннигиляции при увеличении расстояния между дефектами постепенно увеличивается, а затем начинает расти скачкообразно (см. рис.5). Так, например, в расчетном блоке алюминия при девяти межатомных расстояниях между дефектами, траектория смещений атомов от межузельного атома к вакансии имеет ломаный вид, в результате чего время аннигиляции дефектов сильно возрастает, и составляет 133.72 пс эксперимента. При восьми межатомных расстояниях между дефектами это время равняется 10.90 пс.

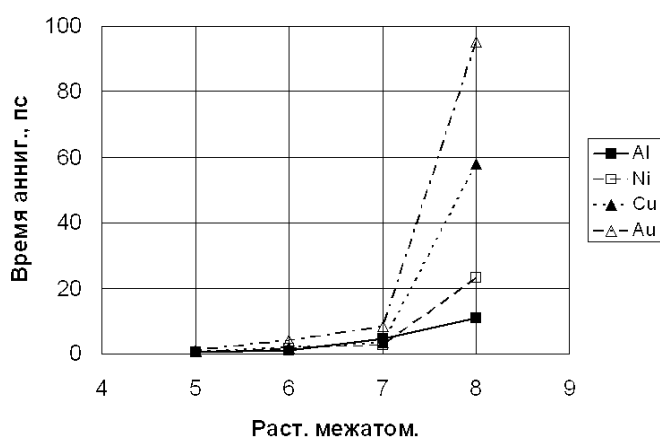


Рис.5. Зависимость времени аннигиляции точечных дефектов от расстояния между ними для основных ГЦК металлов.

В дальнейшем эксперимент проводился при различной разориентировки дефектов относительно друг друга. За нулевой угол разориентации принимается положение дефектов вдоль плотноупакован-

ного направления типа  $\langle 110 \rangle$ , а, следовательно, расположение дефектов вдоль направления типа  $\langle 112 \rangle$  принимается за угол равный 30 градусам. Благодаря симметрии решетки, при девяти межатомных расстояниях между дефектами, возможны четыре положения вакансии с различной ориентацией к межузельному атому. Компьютерный эксперимент показал, что подобная разориентация дефектов, приводит к тому, что межузельный атом может смещаться от вакансии в сторону. В результате этого аннигиляция дефектов не наблюдается, несмотря даже на то, что расстояние между ними в этих случаях меньше чем вдоль плотноупакованного направления.

При меньшем расстоянии между дефектами число возможных разориентированных положений уменьшается. Исследование показало, что наименьшее время аннигиляции дефектов наблюдается при расположении их вдоль плотноупакованного направления типа  $\langle 110 \rangle$ . Кроме этого при расположении дефектов на шести межатомных расстояниях и менее, достаточно быстрая аннигиляция дефектов наблюдается и по направлениям типа  $\langle 112 \rangle$ , то есть при угле разориентации равном 30 градусам. При расположении же дефектов в промежуточных направлениях время аннигиляции значительно увеличивается, так как упаковка атомов в этих направлениях является наименее плотной.

Стоит отметить, что при сближении вакансии и межузельного атома на четыре межатомных расстояния, разориентация практически не влияет на время их аннигиляции. Так для расчетного блока алюминия при расположении данных дефектов вдоль направления типа  $\langle 110 \rangle$ , аннигиляция наблюдается через 0.38 пс эксперимента, а при расположении вдоль не плотноупакованных направлений – через 0.37 пс.

Третий раздел главы посвящен изучению механизмов аннигиляции пары точечных дефектов. Исследование показало, что в процессе релаксации кристаллической структуры содержащей пару Френкеля, межузельный атом инициирует эстафетные атомные смещения по направлению к вакансии, образуется движущийся краудион, и дефекты рекомбинируют. Этот процесс можно рассматривать как заключительный этап процесса релаксации.

В случае если межузельный атом располагался на достаточно большом расстоянии от вакансии, в течение эксперимента он сближался с ней на некоторое критическое расстояние, начиная с которого возникали эстафетные атомные смещения.

Расчеты показывают, что скорость передачи импульса атомами друг другу при таких смещениях, или что то же самое, скорость массопереноса, значительно превышает скорость звука в рассматриваемом материале, и убывает от более легкого по атомной массе металла, к более тяжелому.

В следующем разделе главы изучается влияние на вышеописанные релаксационные процессы всесторонней деформации расчетного

блока, и его начальной температуры. Эксперименты показывают, что величина смещений атомов в поле дефектов при всестороннем сжатии значительно увеличивается по сравнению с недеформированным расчетным блоком, а при растяжении, наоборот, уменьшается. Кроме этого деформация влияет и на время аннигиляции пары Френкеля. Так, например, всестороннее сжатие расчетного блока, содержащего пару дефектов на девяти межатомных расстояниях, на 5%, приводит к тому, что время аннигиляции уменьшается до 38.80 пс. При всестороннем сжатии растет и скорость эстафетных атомных смещений.

Повышение начальной температуры расчетного блока приводит в первую очередь к нарушению симметрии ударных атомных смещений в поле дефектов. Кроме этого в ряде экспериментов по изучению рекомбинации пар Френкеля наблюдалось удаление межузельного атома от вакансии, в результате чего аннигиляция дефектов не наблюдалась. Влияние же начальной температуры на скорость эстафетных атомных смещений отмечено не было.

В заключительном разделе главы приведены результаты исследования релаксации кристаллической структуры содержащей точечные дефекты, расположенные случайным образом. Отмечено образование межузельными атомами подвижных комплексов, а при повышении температуры, комплексы образуют и вакансии.

**В четвертой главе** приводятся результаты экспериментов по исследованию процесса релаксации кристаллической структуры содержащей точечные дефекты, сгруппированные в ряды вдоль плотноупакованных направлений.

В первом разделе главы приведены результаты исследования возникновения и распространения продольной волны порожденной рядами дефектов. Показано, что при группировке дефектов в ряды смещения атомов, окружающих их, носит согласованный характер.

В случае одиночного дефекта, распространяющаяся продольная волна имеет форму окружности. Увеличение числа дефектов приводит к тому, что ударная волна концентрируется в направлении перпендикулярном ряду дефектов, симметрично распространяясь в противоположные стороны. Благодаря этому эффекту, увеличение числа дефектов в ряду приводит к изменению формы продольной волны на эллипсоидную (см. рис. 6). При этом, чем больше дефектов сгруппировано в ряд, тем сильнее искажается продольная волна, что свидетельствует о большей интенсивности и направленности ударной волны.

Следующий раздел посвящен исследованию релаксации кристаллической структуры содержащей два равных по длине ряда точечных дефектов (см. рис.7.а). В конце эксперимента, когда аннигиляция дефектов уже произошла, визуализатор атомных смещений показывает траектории кооперативных атомных смещений по направлению от межузельных атомов к вакансиям (см. рис.7.б). Подобные коо-

перативные атомные смещения представляют собой бездиффузионный процесс.

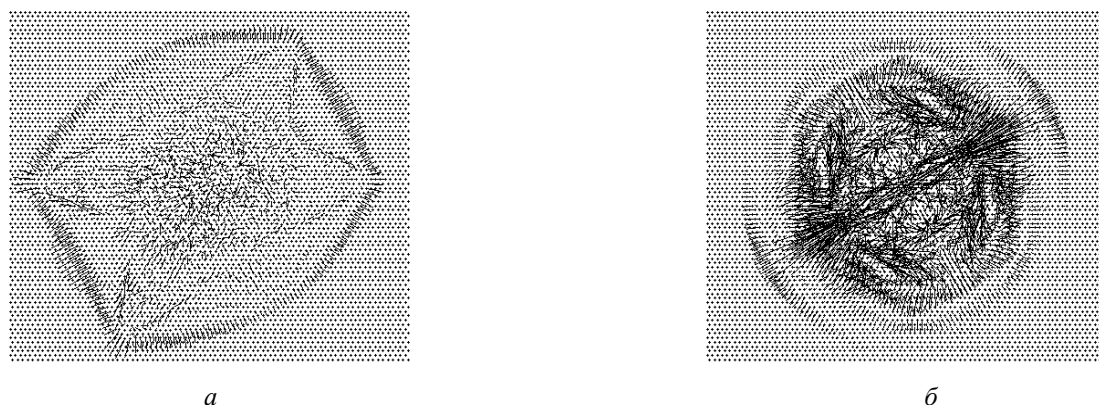


Рис. 6. Продольные волны, порожденные рядами из восьми межузельных атомов (а) и восьми вакансий (б). В первом случае смещения увеличены в 100 раз, а во втором – в 1500.

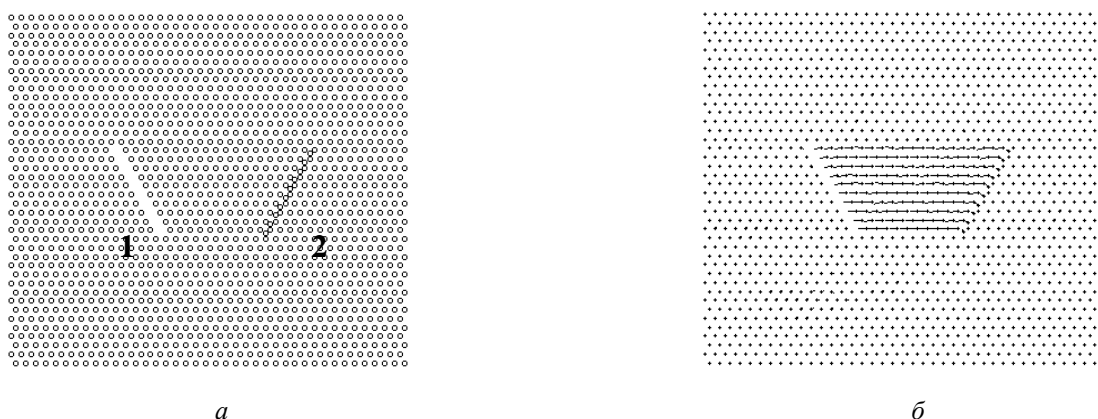


Рис.7. Внешний вид расчетного блока в начале эксперимента (а) и картина атомных смещений в конце эксперимента (б). Индексами 1 и 2 обозначены ряды вакансий и межузельных атомов соответственно.

Инициатором кооперативных атомных смещений является продольная волна, порожденная рядом межузельных атомов. Оценки скорости массопереноса показывают, что она превышает скорость звука в данном материале. Под скоростью массопереноса понималось отношение расстояния между дефектами ко времени их аннигиляция, с момента начала эксперимента. Среднее значение скорости массопереноса в рассматриваемом случае составляет 10819.53 м/с. Подобные высокоскоростные кооперативные атомные смещения могут иметь место, например, при мартенситных фазовых превращениях.

Компьютерный эксперимент показал, что увеличение расстояния между рядами дефектов приводит к уменьшению скорости массопереноса. Уменьшение числа дефектов также снижает скорость пере-

носа массы. Интересно, что при двух дефектах, получившийся вакансионный комплекс является подвижным. Он смещается на одно межузельное расстояние ближе к межузельным атомам при прохождении через него продольной волны порожденной дефектами внедрения. Кроме этого, в течение эксперимента данный комплекс продолжает свое движение, при этом иногда даже меняя свою ориентацию относительно ряда межузельных атомов.

Расположение рядов дефектов под различным углом друг к другу приводит к излому траекторий атомных смещений, но согласованность движения при этом не нарушается.

В третьем разделе четвертой главы детально рассматривается продольная волна, инициирующая кооперативные атомные смещения.

Воздействие ударной волны на структуру кристалла, приводит к тому, что атомы смещаются в противоположные стороны перпендикулярно ряду межузельных атомов по направлениям типа  $\langle 112 \rangle$ . Первая группа смещенных атомов равна удвоенному числу дефектов внедрения в ряду. Все последующие группы уменьшаются на один атом, и в итоге картина смещений атомов принимает вид двух клиньев (см. рис.8).

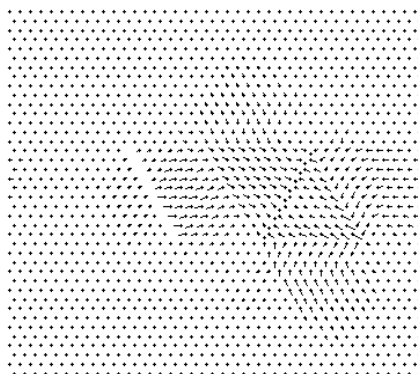


Рис.8. Атомные смещения в виде двух клиньев через 0.40 пс эксперимента.

Подобное распространение атомов, приводит к значительному искажению кристаллической решетки. Вершины клиньев формируют области повышенной плотности материала, которые в дальнейшем распространяются по кристаллу. Боковые грани представляют собой области пониженной плотности материала. В местах разрывов атомных рядов, образуются элементы, которые можно назвать в терминах дислокаций как диски внедренных атомов или вакансий, которые перемещаются по кристаллу в направлении распространения волны (см. рис.9).

В дальнейшем избыточная масса переносится распространяющейся по кристаллу продольной волной порожденной рядом межузельных атомов. Именно с этим переносом связано искажение формы продольной волны. Как было отмечено ранее, большее число дефек-

тов внедрения приводит к большому искажению формы волны. Очевидно, что чем больше дефектов сгруппировано в ряд, тем выше интенсивность ударной волны, и, следовательно, сильнее искажается кристаллическая решетка.

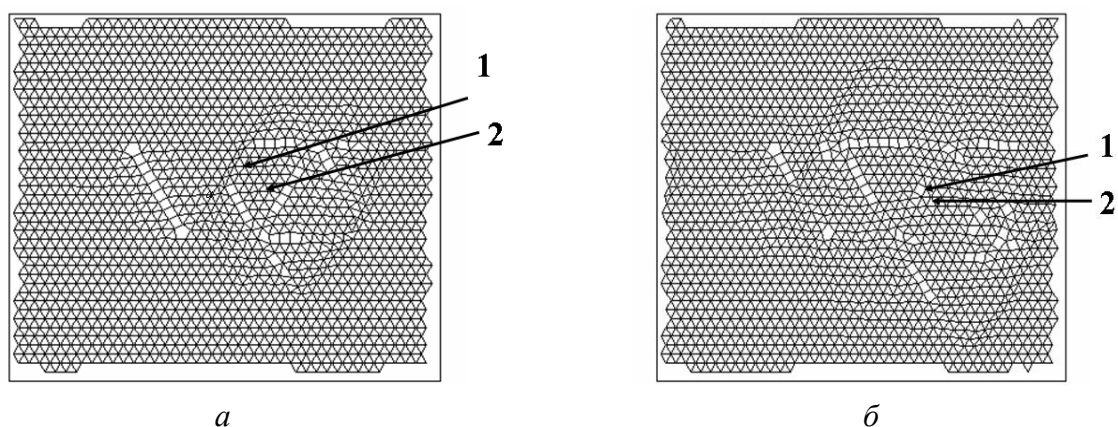


Рис.9. Атомные ряды через 0.20 пс (а) и 0.40 пс (б) эксперимента. Стрелкой №1 указан диск внедренных атомов, стрелкой №2 – вакансионный диск.

В дальнейшем избыточная масса переносится распространяющейся по кристаллу продольной волной порожденной рядом межузельных атомов. Именно с этим переносом связано искажение формы продольной волны. Как было отмечено ранее, большее число дефектов внедрения приводит к большому искажению формы волны. Очевидно, что чем больше дефектов сгруппировано в ряд, тем выше интенсивность ударной волны, и, следовательно, сильнее искажается кристаллическая решетка.

Области повышенной плотности перемещаются в противоположные стороны по направлению ударных смещений атомов в полях межузельных атомов. Поэтому если расположить дефекты так, чтобы ударные смещения были направлены не в сторону вакансий, то аннигиляция дефектов при распространении продольной волны наблюдаться не будет.

Четвертый раздел главы посвящен исследованию влияния деформации и температуры расчетного блока, на процесс массопереноса в кристалле, содержащем ряды дефектов. Компьютерный эксперимент показал, что также как и в случае с одиночной парой Френкеля, всесторонняя деформация расчетного блока приводит к увеличению скорости массопереноса, в то время как при растяжении наблюдается ее уменьшение. Увеличение начальной температуры расчетного блока приводит к нарушению симметрии ударных атомных смещений, но не влияет на скорость массопереноса.

В заключительном разделе главы проведено исследование процесса релаксации кристаллической структуры содержащей ряды дефектов не равные по длине. Компьютерный эксперимент показал, что



после аннигиляции парных дефектов, оставшиеся вакансии или межузельные атомы объединяются в комплексы. При этом длина вакансионного ряда не влияет на скорость массопереноса, в то время как при уменьшении ряда межузельных атомов скорость массопереноса снижается. Кроме этого показано, влияние длины рядов на среднюю энергию расчетного блока, приходящуюся на один атом.

**В пятой главе** приводятся результаты исследования релаксационных процессов в объемной кристаллической структуре содержащей одиночные точечные дефекты, а также их комплексы.

Первый раздел главы, посвящен возникновению и распространению в кристалле продольной релаксационной волны. Стоит отметить, что в трехмерной модели межузельный атом можно расположить в двух положениях: октаэдрической и тетраэдрической пустоте. Ударные смещения атомов в поле межузельного атома расположенного в тетраэдрической пустоте, почти в два раза больше аналогичных смещений атомов в поле дефекта размещенного в октаэдрической пустоте.

Картина атомных смещений в поле вакансии для трехмерной структуры, ничем не отличается от плоской модели. Но меняется зависимость величины ударных смещений от времени эксперимента (см. рис.10). Интересно, что они представляют собой колебательное движение атомов. В связи с этим можно предположить, что такое движение должно породить несколько продольных волн следующих одна за другой. И действительно, как показывает эксперимент, такое распространение волн существует.

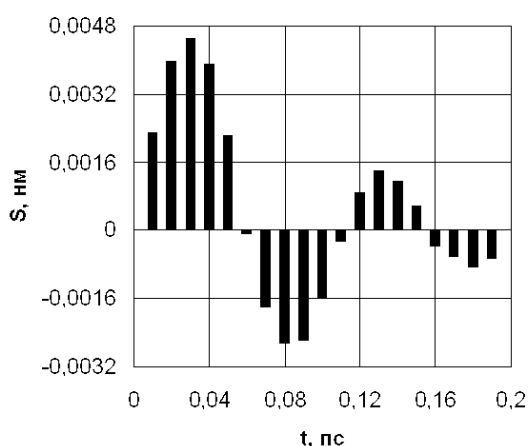


Рис.10. Временные зависимость смещений атомов первой группы в поле вакансии для расчетного блока алюминия.

Исследование смещений атомов в полях комплексов дефектов показало следующее. Группировка в ряд межузельных атомов, размещенных в октаэдрической пустоте, приводит к ударным атомным смещениям, различающимся друг от друга по величине. Кроме этого

нарушается симметрия смещений. Увеличение числа дефектов приводит к тому, что большая часть атомов смещаются в направлении перпендикулярном ряду дефектов, но при этом, в отличие от двумерной модели, траектории смещений не являются параллельными.

При группировке в ряд межузельных атомов размещенных в тетраэдрической пустоте, симметрия атомных смещений также нарушается, но в этом случае величины смещений приблизительно равны. Увеличение числа дефектов, сгруппированных в ряд, приводит к тому, что межузельные атомы начинают хаотически смещаться из первоначальных положений, в результате чего нарушается не только симметрия картины ударных атомных смещений, но также меняются и величины данных смещений. Отметим, что атомы первой группы соседней плоскости, смещающиеся вдоль направления  $\langle 111 \rangle$  от дефекта внедрения, в независимости от числа межузельных атомов, сгруппированных в ряд, сохраняют симметрию и равные величины смещений.

Группировка вакансий в ряды не приводит к каким-либо значительным изменениям в картине атомных смещений, по сравнению с двумерной моделью. Здесь также смещения атомов попадающих под воздействие крайних вакансий ряда направлены к центру дефектов, а атомы, являющиеся общими соседями для двух вакансий, смещаются перпендикулярно ряду дефектов, причем величина их смещений максимальна из всех наблюдаемых в данный момент времени.

Как уже говорилось выше, ударная волна при дальнейшем своем распространении в кристалле трансформируется в продольную звуковую волну. Начальная скорость волны зависит от величины ударных смещений атомов, а так же от того, как долго сохраняются смещения атомов в определенном направлении. Оценки показали, что скорость распространения продольной волны в трехмерном расчетном блоке алюминия порожденной одиночной вакансией составляет 7643.76 м/с, что примерно в 1.1 раза меньше скорости волны порожденной одиночным межузельным атомом, внедренным в октаэдрическую пустоту. Максимальная же скорость наблюдается у продольной волны порожденной дефектом внедрения, размещенным в тетраэдрической пустоте – 8217.058 м/с. Очевидно, это связано с тем, что максимальные ударные смещения наблюдаются именно при таком расположении межузельного атома.

В следующем разделе главы проведено исследование влияния расстояния, разориентации и числа дефектов на скорость массопереноса в трехмерном кристалле. При расположении дефектов в объемном кристалле алюминия на трех межатомных расстояниях вдоль плотноупакованного направления  $\langle 110 \rangle$ , аннигиляция наблюдалась через 0.25 пс эксперимента, а при расположении дефектов на четырех межатомных расстояниях, время аннигиляции увеличивалось до 0.53 пс. Дальнейшее увеличение расстояния между дефектами приводит к тому, что межузельный атом начинает удаляться от вакансии, и, вы-

теснив из узла решетки один из атомов, образует с ним устойчивую конфигурацию: гантель. Расположение межузельного атома в тетраэдрической пустоте приводит к уменьшению времени рекомбинации пары дефектов. Кроме этого, увеличивается и максимальное расстояние, на котором могут быть расположены дефекты, чтобы наблюдалась их аннигиляция.

Сравнение с двумерной моделью показало, что время аннигиляции пары точечных дефектов в трехмерной модели в среднем больше в 1.6 раза. Кроме этого, если в плоской модели дефекты аннигилировали даже при расположении их на девяти межатомных расстояниях друг от друга, то в объемной модели максимальное расстояние, при котором наблюдается аннигиляция, уменьшается до пяти.

Разориентация вакансии относительно межузельного атома также приводит к увеличению времени аннигиляции. Эксперименты проводились при расположении дефектов в расчетном блоке алюминия на тех же расстояниях что были описаны выше, но в данном случае они размещались не вдоль плотноупакованного направления, а с разориентацией вакансии относительно межузельного атома на некоторый угол. Благодаря симметрии кристаллической структуры, при таких малых расстояниях между дефектами существует лишь одно разориентированное положение. Подобная конфигурация пары дефектов приводит к тому, что время аннигиляции при трех и четырех межатомных расстояниях, в случае, когда межузельный атом располагается в октаэдрической пустоте, составляет соответственно 0.64 и 3.57 пс эксперимента. Расположение же межузельного атома в тетраэдрической пустоте уменьшает это время в среднем в два раза.

Исследование влияния расстояния между рядами дефектов на скорость массопереноса показало, что увеличение расстояния приводит к снижению скорости. При этом в трехмерной модели расстояние оказывает на скорость большее влияние, чем в двумерной модели. Кроме этого, к снижению скорости массопереноса приводит уменьшение числа дефектов в рядах.

Заключительный раздел главы посвящен исследованию влияния деформации и начальной температуры расчетного блока на релаксационные процессы в объемном кристалле. Все выводы сделанные на двумерной модели подтвердились. Всестороннее сжатие расчетного блока приводит к увеличению атомных смещений в полях точечных дефектов, уменьшает время аннигиляции и увеличивает расстояние, на котором дефекты взаимодействуют друг с другом. Кроме этого, сжатие приводит к увеличению скорости массопереноса. Увеличение начальной температуры расчетного блока приводило к нарушению симметрии атомных смещений, но ее влияние на скорость массопереноса отмечено не было.

Таким образом, компьютерный эксперимент не показал какой либо качественной разницы между двумерной и объемной моделью.

Но надо отметить, что в трехмерной модели плотность атомных упаковок больше, в результате чего скорость развития отдельных элементов процесса релаксации структуры, оказывается ниже.

## ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1. Процесс релаксации кристаллической структуры содержащей точечные дефекты состоит из нескольких этапов. Начальным этапом является возникновение ударных смещений атомов в упругих полях дефектов. Данные смещения формируют ударную волну, которая в дальнейшем трансформируется в продольную звуковую волну. Заключительный этап процесса релаксации представляет собой эстафетные атомные смещения по направлению от межузельных атомов к вакансиям.

2. При наличии в структуре одиночной пары Френкеля, эстафетные атомные смещения создает межузельный атом. В случае комплекса дефектов, данные смещения инициирует продольная волна, порожденная рядом межузельных атомов.

3. Скорость передачи импульса при эстафетных смещениях значительно превышает скорость звука в рассматриваемом материале. Для объемной модели скорость массопереноса оказывается ниже, по сравнению с двумерной моделью. Это связано с более плотной упаковкой атомов в случае трехмерного кристалла.

4. Время рекомбинации пары Френкеля начинает стремительно расти при увеличении расстояния между дефектами. При расположении межузельного атома в тетраэдрической пустоте, время рекомбинации дефектов значительно меньше, чем в случае размещения его в октаэдрической пустоте.

5. Скорость массопереноса у разных ГЦК кристаллов убывает от более легкого по атомной массе металла, к более тяжелому.

6. Всестороннее сжатие расчетного блока приводит к увеличению ударных смещений, скорости ударной волны и скорости массопереноса.

## ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Маркидонов А.В. Частота колебаний фронта пластического сдвига // «Наука в вузе: современные тенденции». Материалы Всероссийской научно-практической конференции. Новокузнецк, 2007. ч.1. С.4-16.

2. Тихонова Т.А., Неверов В.В., Маркидонов А.В. Приведенная масса как мера инертности волновых движений // «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений». Ма-

териалы IV Международной школы-конференции. Тамбов, 2007. С.196-197.

3. Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Неверов В.В. Перемещение массы пластическими сдвигами // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2007. т.4. №2. С.41-46.

4. Тихонова Т.А., Маркидонов А.В., Неверов В.В. Особенности кондуктивного переноса массы при деформации твердых тел // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2007. т.4. №4. С.79-82.

5. Маркидонов А.В., Неверов В.В. Модель колебаний фронта сдвига // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2008. т.5. №3. С.123-127.

6. Маркидонов А.В., Тихонова Т.А. Свойства массы движения пластических сдвигов // «Молодые ученые - 2008». *Материалы V Международной научно-технической школы-конференции*. Москва, 2008. ч.1. С.64-67.

7. Маркидонов А.В. Расчет скорости испаривания трещины // *Тезисы докладов IX молодежной школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния*. Екатеринбург, 2008. С.29.

8. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А. Нелинейный высокоскоростной массоперенос в двумерном кристалле при наличии локальных областей с различной плотностью // *Ползуновский альманах*. 2008. № 3. С.226-228.

9. Маркидонов А.В. Масса движения трещин отрыва // «Наука. Технологии. Инновации». *Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых*. Новосибирск, 2009. ч.2. С.93-95.

10. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. Расчет массы движения трещины отрыва // *Электроника Сибири*. 2008. №3. С.135-137.

11. Маркидонов А.В. Частота колебаний фронта сдвига // *Материалы XV Всероссийской научной конференции студентов физиков и молодых ученых (ВНКСФ - 15)*. Кемерово, 2009. С.614.

12. Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Старостенков М.Д. Влияние начальной температуры на скорость кооперативных атомных смещений // «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к Наноиндустрии». *Тезисы докладов второй всероссийской конференции с международным интернет - участием*. Ижевск, 2009. С. 75.

13. Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Старостенков М.Д. Исследование массопереноса в двумерном нанокристалле чистого Al // «Современные техника и технологии». *Труды XV Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых*. Томск, 2009. т.3. С.510-512.

14. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. Изучение переноса массы при снижении касательных напряжений на участках сдвига // «Перспективные материалы и технологии». *Сборник тезисов международного симпозиума*. Витебск, 2009. С.53.

15. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Высокоскоростной перенос массы посредством крوديонных столкновений // «Перспективные материалы и технологии». Сборник тезисов международного симпозиума. Витебск, 2009. С.55.
16. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Примеры высокоскоростного переноса массы в идеальных монокристаллах без разрушения его структуры // «Наноиндустрия Алтая 2009». Тезисы докладов I региональной научно-практической конференции. Бийск, 2009. С.33-35.
17. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Медведев Н.Н., Тихонова Т.А. Моделирование переноса массы в виде рядов вакансий и межузельных атомов // «Физика прочности и пластичности материалов». Тезисы докладов XVII международной конференции. Самара, 2009. С.37.
18. Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Старостенков М.Д. Моделирование массопереноса на примере объемного ГЦК кристалла // «Новые материалы. Создание, структура, свойства - 2009». Труды Всероссийской конференции с элементами научной школы для молодежи. Томск, 2009. С.268-272.
19. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А. Высокоскоростной массоперенос в кристалле при наличии различных конфигураций точечных дефектов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2009. т.6. №1. С.12-16.
20. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Высокоскоростной массоперенос в двумерном кристалле никеля при наличии дислокационных петель различной локальной плотности // Изв. вузов. Черная металлургия. 2009. №6. С.57-60.
21. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Потекаев А.И., Кулагина В.В. Высокоскоростной массоперенос в кристаллическом алюминии, содержащем цепочки вакансий и межузельных атомов // Изв. вузов. Физика. 2009. т.52. №9/2. С.139-145.
22. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Захаров П.В. Волны, возникающие при рекомбинации пар Френкеля в двумерных модельных решетках металлов и их влияние на дрейф агрегатов точечных дефектов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2009. т.6. №2. С.8-13.
23. Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Неверова Т.И., Старостенков М.Д. Моделирование незавершенного массопереноса на примере двумерного нанокристалла // «Ультрадисперсные порошки, наноструктуры, материалы: получение, свойства, применение. V Ставеровские чтения». Труды научно-технической конференции с международным участием / Под ред. В. Е. Редькина. Красноярск, 2009. С.13-15.