

КООПЕРАТИВНЫЕ АТОМНЫЕ СМЕЩЕНИЯ ВБЛИЗИ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ Ni- γ Fe

Методом молекулярной динамики исследованы кооперативные атомные смещения вблизи межфазной границы в условиях твердофазного контакта биметалла Ni- γ Fe. Выявлены различия в поведении атомов Ni и Fe при их участии в процессе межграничного массопереноса.

В настоящее время остается достаточно много нерешенных вопросов, связанных с атомной структурой межфазных границ и механизмами их взаимодействия с различными дефектами, порожденными, например, радиационным воздействием. В частности, особый интерес вызывают кооперативные атомные смещения вблизи межфазных границ и их вклад в транспорт энергии и массы.

В работе показано, что внедрение межузельных атомов вблизи межфазной границы может вызывать кооперативные атомные смещения, приводящие к переползанию дислокаций несоответствия. Все кооперативные атомные смещения протекали по краудсионному механизму вдоль плотноупакованных рядов. Выявлены различия поведения таких атомных смещений от количества внедренных атомов, и их типа. Различия в поведении атомов, по всей видимости, объясняются высокой энергией связи типа Ni- γ Fe по сравнению со связями типа γ Fe- γ Fe, в результате чего атомы Fe оказываются более подвижными, чем атомы Ni, и проникают через межфазную границу гораздо интенсивнее. Подобная активность атомов Fe вблизи межфазной границы Ni- γ Fe создает предпосылки для рассмотрения подобных граничных явлений в качестве основы для создания новых материалов с определенными заданными свойствами.

Ключевые слова: биметалл, кооперативные атомные смещения, дислокация несоответствия, межфазная граница, метод молекулярной динамики.

Введение

Различные биметаллические соединения активно применяются во многих областях науки и техники. Среди прочих биметаллов особый интерес вызывают соединения Ni- γ Fe.

Границы раздела в биметаллических материалах (в частности, межфазные границы) играют ключевую роль во многих процессах, и определяют многие их физические свойства. Знание процессов взаимодействия дефектов с межфазными границами необходимо для теоретического описания и моделирования различных физических процессов.

Дислокации, характерные для межфазных границ, образуются, в том числе, и вследствие несоответствия параметров решеток металлов (так называемые дислокации несоответствия) [1], [2]. Отличие параметров решеток приводит к формированию дислокаций несоответствия на межфазной границе, и чем выше это отличие, тем, очевидно, выше плотность дислокаций. В работах [1], [3] отмечается, что из-за несовершенства структуры границы фаз могут обнаруживать высокую проницаемость. В определенных условиях возможно термоускорение массопереноса вещества на межфазных

границах, что имеет подтверждение в экспериментальной практике [1]–[5].

Однако в настоящее время остается достаточно много нерешенных вопросов, связанных с атомной структурой межфазных границ и механизмами их взаимодействия с различными дефектами на атомном уровне, в частности, с механизмами процессов кооперативных атомных смещений.

В связи с выше изложенным, целью данной работы является изучение поведения атомов вблизи межфазной границы в условиях твердофазного контакта биметалла Ni- γ Fe при наличии межузельных атомов.

Решение подобных вопросов с помощью реальных экспериментов в настоящее время весьма затруднительно, поскольку для этого необходимы исследования атомной структуры и ее динамики. Также исследуемые в данной работе процессы отличает высокая скорость протекания, что затрудняет прямые наблюдения. Поэтому в данном случае наиболее рациональным видится использование метода компьютерного моделирования, который позволяет проводить исследования и прогнозировать протекание тех или иных процессов в требуемых материалах на

различных масштабных уровнях, в том числе и на атомном уровне. Это дает возможность 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. Данный метод является хорошим дополнением к известным теоретическим и экспериментальным методам исследования физических процессов, зачастую даже выступает в роли связующего звена между ними.

В качестве метода компьютерного моделирования нами был выбран метод молекулярной динамики, которые позволяет проводить эксперименты с заданными скоростями атомов и описывать динамику исследуемых процессов в реальном времени. Данный метод хорошо себя зарекомендовал при изучении процессов на границе раздела металлов [6]–[10].

Подобные исследования процессов кооперативных атомных смещений вблизи межфазных границ металлов имеют определенное значение при решении проблем, связанных с наноструктурными и низкоразмерными материалами.

Описание модели и методики эксперимента

Для исследования атомной структуры и процессов, происходящих вблизи межфазных границ в условиях термоактивации массопереноса, компьютерное моделирование проводилось с помощью двумерных моделей.

Двумерная модель, несмотря на очевидно меньшую ее достоверность по сравнению с трехмерной моделью, тем не менее, обладает важными преимуществами: размером (можно моделировать гораздо более длинную межфазную границу) и наглядностью (визуализация структуры существенно проще).

В качестве исходных металлов были взяты ГЦК металл Ni и металл γ Fe, имеющий также ГЦК структуру, с примерно одинаковыми параметрами решеток (Ni – 3,524 Å, γ Fe – 3,637 Å) и с примерно близкими модулями упругости (модуль упругости Ni = 196–210 ГПа, γ Fe = 190–211 ГПа) [11], [12]. Как видим, параметры Ni и γ Fe имеют сравнительно близкие значения (отличие параметров решеток 3,2%, отношение упругих модулей Ni/ γ Fe равно 0,99).

Проведению основных молекулярно-динамических экспериментов предшествовал этап подготовки исходных структур расчетных блоков, содержащих требуемую межфазную границу. Подготовка включала в себя создание биметаллического расчетного блока с заданными параметрами, динамическую релаксацию структуры расчетного блока с приведением ее в состояние с минимальной энергией и последующее охлаждение блока.

При исследовании кооперативных атомных смещений вблизи межфазной границы в условиях твердофазного контакта используемая компьютерная модель представляла собой двумерный кристалл [13]. Расчетный блок (ячейка) представлял собой прямоугольник со сторонами 60 на 60 частиц, содержащий около 3600 атомов, межфазная граница раздела металлов проходила через середину расчетного блока (ячейки). В верхней половине расчетного блока был расположен Ni, в нижней – γ Fe (см. рис. 1). Взаимодействия между атомами описывались с помощью потенциалов Морзе. Для определения параметров взаимодействия атомов одного сорта использовались характеристики чистых металлов, а для определения параметров взаимодействия атомов разного сорта использовались характеристики упорядоченных сплавов. Параметры потенциалов Морзе были взяты из

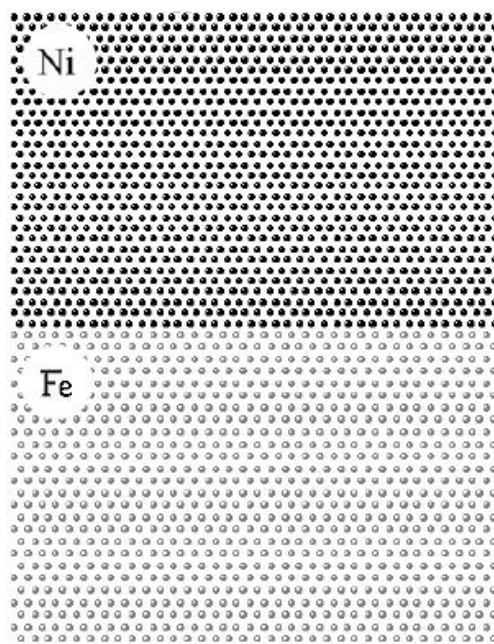


Рисунок 1. Расчетная ячейка биметалла Ni- γ Fe.

работ [14]–[16]. Опыт применения данных потенциалов показывает, что с их помощью удастся описать разнообразные свойства металлов и сплавов [17], [18]. Для приближения к реальным кристаллам на расчетный блок (ячейку) накладывались граничные условия. Вдоль межфазной границы задавались периодические граничные условия, поперек – свободные, позволяющие расчетному блоку изменять свой объем.

После первоначального создания биметалла для приведения структуры расчетного блока в равновесное состояние (в данных условиях) проводилась структурная релаксация системы относительно смещений атомов дефектной области [19]–[21]. Искусственно созданная граница раздела металлов подвергалась процедуре структурной релаксации, в течение которой граничные атомы занимали равновесное положение. В процессе первоначальной структурной релаксации при низкой температуре, в ходе которой происходило сопряжение контактирующих металлов, на межфазной границе в результате несоответствия параметров решеток контактирующих металлов образовывались дислокации (дислокации несоответствия) и в итоге формировалась межфазная граница с характерными дислокациями несоответствия (см. рис. 2).

В результате структурной релаксации наблюдалось повышение температуры расчетного блока (ячейки) до нескольких десятков Кельвин. Поэтому после завершения структурной релаксации расчетный блок охлаждался до 0 К. Время релаксации расчетного блока (ячейки) составляло 100 пс, на этап его охлаждения было отведено 10 пс. Таких временных рамок эксперимента достаточно для того, чтобы расчетный блок (ячейка) успел избавиться от лишнего свободного объема, который возникал на границе

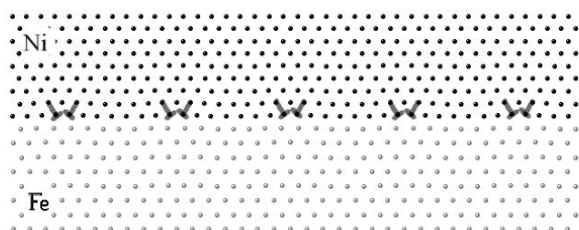


Рисунок 2. Граница биметалла Ni- γ Fe со сформированными дислокациями несоответствия.

металлов при создании начальной структуры [6], [7], [10], [22].

Далее в структуре исследуемого расчетного блока (на стороне Ni или на стороне γ Fe) создавались дефекты в виде межузельных атомов, путем внедрения в того или иного атома (Ni или Fe) на разном удалении от межфазной границы. При проведении исследования взаимодействия внедренных дефектов с межфазной границей Ni- γ Fe в расчетный блок вводился один межузельный атом (или сразу несколько в ряд) в две различные позиции в атомном ряду: выше этого ряда или ниже его. После введения точечного дефекта задавалась начальная температура, и наблюдался процесс миграции атомов вблизи межфазной границы.

Для моделирования кооперативных атомных смещений расчетные блоки нагревались до различной температуры. Температура задавалась через начальные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла. При этом суммарный импульс атомов в расчетном блоке был равен нулю.

При исследовании массопереноса вблизи межфазной границы для каждой заданной температуры и каждого вида внедренного атома (Ni или Fe) в ходе молекулярно-динамического эксперимента определялось время от внедрения точечного дефекта до окончания кооперативных атомных смещений, приводящих к вытеснению атома из приграничного слоя в соседний металл.

Для визуального изучения интенсивности механизма кооперативных атомных смещений вблизи межфазных границ процесс миграции атомов исследовался с помощью визуализатора атомных смещений относительно начальных положений. Смещения атомов из начальных положений визуализировались программой непосредственно в процессе компьютерного эксперимента, что позволяло наблюдать смещения атомов в динамике.

Результаты и их обсуждения

Для рассматриваемых межфазных границ изучены процессы миграции атомов разного сорта поперек межфазной границы при различных заданных начальных температурах и различных расстояниях от внедренных межузельных атомов до межфазной границы.

Большая часть результатов получена для системы Ni- γ Fe при заданной начальной температуре образца, отличной от 0 К, и при внедрении в образец одновременно целого ряда межузельных атомов, что вызвано тем, что число внедренных межузельных атомов в данном случае почти напрямую оказывает влияние на интенсивность протекающих процессов массопереноса.

Внедрение межузельного атома на стороне Ni на расстояние от 1 до 5-ти атомных рядов от межфазной границы, вне зависимости от количества внедренных атомов (от 1 до 5 атомов в ряд), от сорта атома (Ni или Fe) и от его расположения выше или ниже атомного ряда не приводило к массопереносу на сторону γ Fe при любой заданной начальной температуре от 0 до 500 К.

Внедрение межузельного атома на стороне γ Fe на расстояние 3-х атомных рядов от межфазной границы приводило к массопереносу на сторону Ni уже при начальной температуре 0 К для любого сорта атома (Ni или Fe) вне зависимости от его расположения выше или ниже атомного ряда.

Внедрение межузельного атома на стороне γ Fe на расстояние 5-ти атомных рядов от межфазной границы при начальной температуре 0 К вне зависимости от его расположения выше или ниже атомного ряда либо приводило к массопереносу на сторону Ni (для внедренного атома Fe), либо не приводило к массопереносу на сторону Ni вообще (для внедренного атома Ni). Внедрение же двух межузельных атомов на стороне γ Fe на расстояние 5-ти атомных рядов от межфазной границы при начальной температуре 0 К (одновременно над и под атомным

рядом) приводило к массопереносу на сторону Ni для любого сорта атома (Ni или Fe).

Внедрение одного межузельного атома Ni на стороне γ Fe на расстояние 5-ти атомных рядов от межфазной границы при начальной температуре от 0 до 300 К не приводило к массопереносу на сторону Ni вообще вне зависимости от его расположения выше или ниже атомного ряда при любой заданной температуре (от 0 до 300 К).

Внедрение двух межузельных атомов Ni в ряд на стороне γ Fe на расстояние 5-ти атомных рядов от межфазной границы при начальной температуре 300 К либо не приводило к массопереносу на сторону Ni вообще (при внедрении атомов Ni под атомным рядом), либо приводило к массопереносу на сторону Ni (при внедрении атомов Ni над атомным рядом). Внедрение же трех межузельных атомов Ni в ряд на стороне γ Fe на расстояние 5-ти атомных рядов от межфазной границы при начальной температуре 300 К приводило к массопереносу на сторону Ni вне зависимости от их расположения выше или ниже атомного ряда.

На рис. 3 с помощью визуализатора атомных смещений изображены примеры реализации механизма кооперативных атомных смещений вблизи межфазной границы в процессе компьютерного эксперимента (в данном случае – результат внедрения трех межузельных атомов Ni в ряд выше атомного ряда на стороне γ Fe на расстояние 5-ти атомных рядов от межфазной границы при начальной температуре 300 К).

Таким образом, при исследовании кооперативных атомных смещений вблизи межфазных границ типа Ni- γ Fe в процессе компьютерного

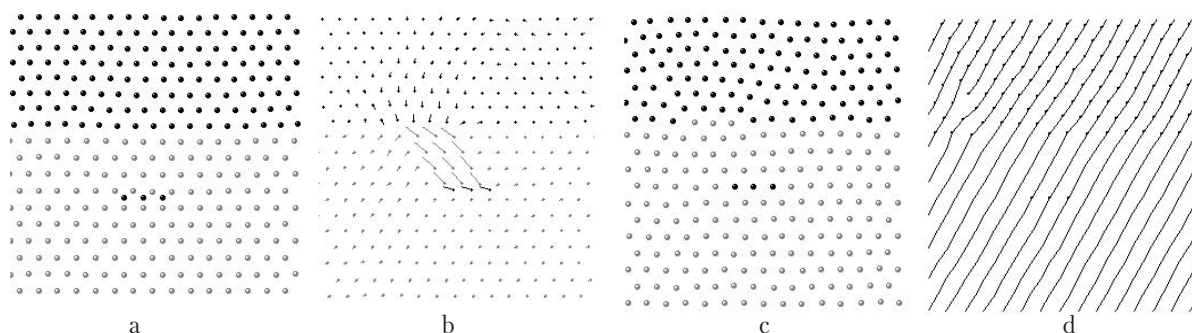


Рисунок 3. Примеры атомных смещений вблизи межфазной границы биметалла Ni- γ Fe: а) начальная конфигурация межузельных атомов Ni относительно границы металлов, б) визуализация кооперативных атомных смещений, в) межфазная граница после кооперативных атомных смещений, г) визуализация атомных рядов вдоль одного из плотноупакованных направлений.

молекулярно-динамического эксперимента с помощью двумерной компьютерной модели мы рассмотрели механизм кооперативных атомных смещений вблизи межфазной границы Ni- γ Fe и особенности протекания массопереноса и миграции атомов через межфазную границу в условиях различных начальных температур при внедрении межузельных атомов.

В результате моделирования с помощью метода молекулярной динамики атомной структуры межфазных границ Ni- γ Fe и процессов, протекающих вблизи них на атомном уровне, нами было обнаружено, что при любых начальных температурах на межфазных границах Ni- γ Fe массоперенос вызывался в основном внедрением атомов Fe.

Вблизи межфазной границы точечные дефекты, как правило, стремятся мигрировать в ближайший узел дислокации. Поэтому при введении межузельных атомов вблизи межфазной границы в процессе компьютерного эксперимента они мигрировали в ближайший узел дислокации. При этом массоперенос протекает в основном при небольшой термоактивации процесса.

Механизм массопереноса вблизи межфазных границ двух металлов зависит от энергии связи их разнородных атомов, от соотношения параметров решеток и модулей упругости. Так, для межфазной границы Ni- γ Fe мы наблюдали сдвиги атомов, распространяющиеся от первоначального положения дислокации и передающиеся соседним атомам. В результате чего наиболее близкие к межфазной границе атомы перемещались в соседний металл.

В результате образования новых межатомных связей Ni- γ Fe дислокации несоответствия посредством переползания смещались в сторо-

ну Ni. Это можно объяснить, например, размерным несоответствием существующих межатомных связей (Ni-Ni и γ Fe- γ Fe) и образующихся связей Ni- γ Fe – связи Ni-Ni оказались сильнее связей Ni- γ Fe (поэтому атомы Ni практически не смещались), а связи Ni- γ Fe значительно крепче связи γ Fe- γ Fe, вследствие чего атомы Fe оказывались более подвижными, и именно они перемещались через межфазную границу (раз энергия связи в Ni более высокая, чем в γ Fe, то положение дефекта в Ni является энергетически более выгодным).

Отметим, что все кооперативные атомные смещения протекали по краудинному механизму вдоль плотноупакованных рядов.

Заключение

Методом молекулярной динамики исследованы кооперативные атомные смещения вблизи межфазной границы в условиях твердофазного контакта биметалла Ni- γ Fe. Выявлены различия в поведении атомов Ni и γ Fe при их участии в процессе межграницного массопереноса.

Данные различия в поведении атомов, по всей видимости, объясняются высокой энергией связи типа Ni- γ Fe по сравнению со связями типа γ Fe- γ Fe, в результате чего атомы γ Fe оказываются более подвижными, чем атомы Ni, и проникают через межфазную границу гораздо интенсивнее. Подобная активность атомов Fe вблизи межфазной границы Ni- γ Fe создает предпосылки для рассмотрения подобных граничных явлений в качестве основы для создания новых материалов с определенными заданными свойствами. А также может объяснить ряд эффектов, наблюдаемых при радиационном стимулировании образования дефектных структур в различных материалах.

1.06.2016

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, в рамках проекта № 16-42-220002 р_а.

Список использованной литературы:

1. Бокштейн С.З., Болберова Е.В., Игнатова И.А., Кишкин С.Т., Разумовский И.М. Влияние величины несоответствия параметров решеток фаз на диффузионную проницаемость межфазных границ // Физика металлов и металловедение. – 1985. – Т. 59, №5. – С. 938–942.
2. Тхорик Ю.А., Хазан Л.С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. – Киев – Наукова Думка. – 1990. – 321 с.
3. Бокштейн Б.С. Диффузия в металлах. – М. – Металлургия. – 1978. – 248 с.
4. Полетаев Г.М., Потеев А.И., Старостенков М.Д., Сосков А.А., Клопотов А.А., Кулагина В.В., Гринкевич Л.С. Энергия образования и миграции точечных дефектов в упорядоченных сплавах CuPt и CuPt3. // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, №1. – С. 38–43.
5. Бокштейн С.З. Строение и свойства металлических сплавов. – М. – Металлургия. – 1971. – 496 с.

6. Poletaev G.M., Sannikov A.V., Berdychenko A.A., Starostenkov M.D. Molecular dynamics study of plastic deformation mechanisms near the interphase boundary in two-dimensional bimetallic systems // *Materials Physics and Mechanics*. – 2015. – V. 22, №1. – P. 15–19.
7. Starostenkov M.D., Poletayev G.M., Starostenkov D.M. Structure of interphase boundaries in bimetallic thin films // *Journal of Materials Science and Technology*. – 2001. – V. 17, № 1. – P. 59–60.
8. Маркидонов А.В., Старostenков М.Д., Захаров П.В., Обидина О.В. Перемещение дислокационных ансамблей в ГЦК кристалле при высокоэнергетическом внешнем воздействии // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. – Т. 12, № 3. – С. 373–381.
9. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Старostenков М.Д., Мартынова Е.В., Кайгородова В.М. Исследование условий формирования напряженных тройных стыков границ зерен в никеле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2014. – Т. 11, № 4. – С. 495–500.
10. Санников А.В., Полетаев Г.М., Микрюков В.Р., Старostenков М.Д., Сосков А.А. Атомная структура и диффузионная проницаемость межфазных границ Ni-Al, Cu-Au, Ni-γFe // *Известия вузов. Черная металлургия*. – 2014. – Т. 57, №8. – С. 56–59.
11. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука. – 1978. – 792 с.
12. Смитлз К.Дж. *Металлы: Справ.* – М.: Металлургия. – 1980. – 447 с.
13. Полетаев, Г.М. Моделирование методом молекулярной динамики структурно-энергетических превращений в двумерных металлах и сплавах (MD2) / РОСПАТЕНТ свидетельство № 2008610486 от 25 января 2008.
14. Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A3B и A3B (C). Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. – Томск. – 1987. – 214 с.
15. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старostenков М.Д. Атомная структура АФГ и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой L12 // *Физика металлов и материаловедение*. – 1984. – Т. 58, № 2. – С. 336–343.
16. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старostenков М.Д. Атомная структура АФГ и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой L12 // *ФММ*. – 1984. – Т. 58, №2. – С. 336–343.
17. Бокштейн Б.С. Атомы блуждают по кристаллу. – М.: Наука. Главная редакция физ.-мат. Литературы. – 1984. – 208 с.
18. Полетаев Г.М. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений в объеме кристаллов и вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах. Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. – Барнаул. – 2008. – 40 с.
19. Плишкин Ю.М. Исследование задач диффузии методами машинного моделирования // *Моделирование на ЭВМ дефектов в кристаллах. Тематический сборник*. – Л.: Изд-во ФТИ. – 1980. – С. 23–32.
20. Плишкин Ю.М. Методы машинного моделирования в теории дефектов кристаллов / В кн.: *Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ*. – Л.: Наука. – 1980. – С. 77–99.
21. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике: Пер. с англ. / Под ред. С.А. Ахманова. – М.: Наука. – 1990. – 176 с.
22. Полетаев Г.М., Старostenков М.Д. Динамические коллективные смещения атомов в металлах и их роль в вакансионном механизме диффузии // *Физика твердого тела*. – 2009. – Т.51, №4. – С. 686–691.

Сведения об авторах:

- Захаров Павел Васильевич**, доцент кафедры физики и информатики
Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина,
кандидат физико-математических наук
- Ерёмин Александр Михайлович**, доцент кафедры математики и методики обучения математике
Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина,
кандидат физико-математических наук, доцент
- Манаков Николай Александрович**, профессор кафедры общей физики
Оренбургского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор
460018, г. Оренбург, пр-т Победы, д. 13
- Старostenков Михаил Дмитриевич**, заведующий кафедрой физики
Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова,
доктор физико-математических наук, профессор
656099, г. Барнаул, пр-т Ленина, 46
- Вдовин Роман Сергеевич**, инженер кафедры физики и информатики
Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина
659333, Бийск, ул. Короленко, 53