

ФОКУСИРУЮЩИЕСЯ И КРАУДИОННЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ АТОМОВ Cu В УПОРЯДОЧЕННОМ СПЛАВЕ CuAu СО СВЕРХСТРУКТУРОЙ L1₀

Медведев Н. Н.¹, Старостенков М. Д.², Пожидаева О. В.²

¹*Бийский педагогический государственный университет, Бийск, Россия,*
nm42@rambler.ru

²*Алтайский государственный технический университет, Барнаул, Россия,*
genphys@mail.ru

Изучение радиационного воздействия на материалы является актуальным направлением исследований, тесно связанным с проблемой их прочности.

Фокусирующиеся и краудионные столкновения атомов в моноатомных кристаллах, возникающие как следствия высокоэнергетического внешнего воздействия, были подробно изучены в середине прошлого века [1, 2]. Тем не менее, и в настоящее время к ним имеется определенный интерес [3].

Сущность явления фокусировки атомных столкновений заключается в том, что движущаяся частица, таким образом передает свой импульс неподвижным атомам плотноупакованной цепочки, что он распространяется вдоль цепочки под углом θ к оси цепочки с меньшим при каждом столкновении. Кроме фокусирующихся столкновений существуют и краудионные. Они тесно связаны друг с другом. Отличие в том, что при фокусирующихся передается только импульс, а при краудионных столкновениях передается и вещество – межузельный атом, с возникновением вакансии и краудиона см. обзор [2].

В указанных выше публикациях свойства атомных столкновений изучались, как уже отмечалось, в моноатомных кристаллах. Однако появившиеся, относительно недавно, упорядоченные сплавы со сверхструктурами, в которых легкие атомы плотноупакованных рядов окружены более массивными соседями, очевидно, должны иметь особенности при краудионных и фокусирующихся столкновениях атомов. В настоящей работе методом молекулярной динамики исследуются фокусирующиеся и краудионные столкновения в трехмерной модели упорядоченного сплава CuAu со сверхструктурой L1₀. Для сравнения компьютерные эксперименты проводились также с моделью кристаллической решетки моноатомного Cu.

Взаимодействие между частицами модели упорядоченного сплава, размером $54 \times 9 \times 12$ межатомных расстояний, задавалось парным потенциалом Морзе:

$$V_{AB}(r_{ij}) = D_{AB} \beta_{AB} \exp(-\alpha_{AB} r_{ij}) \cdot (\exp(-\alpha_{AB} r_{ij}) - 2), \quad (1)$$

параметры для которого были заимствованы из работы [4]. Модель кристаллической решетки, построенная таким образом, достаточно хорошо описывает свойства сплава CuAu со сверхструктурой L1₀ в широком диапазоне температур до температуры плавления включительно. Однако она не годится для описания столкновений атомов со скоростями, намного превышающими среднеквадратичную скорость при температуре плавления из-за малости минимальных расстояний на которые сближаются атомы при столкновениях, в диапазоне энергий от 50 до 400 эВ. Проблема была решена с помощью поправочного члена.

Поправочный член представляет собой отталкивающий парный потенциал типа Борна-Майера:

$$V(r) = K \exp\left(-\frac{17.2(r-D)}{D}\right), \quad (2)$$

где r – эффективный диаметр атомов (минимальном расстоянии сближения атомов при данной кинетической энергии), которые считаются твердыми шарами; $D = 2.81 \text{ \AA}$ – расстояние до ближайшего атома, находящегося в равновесии; $K = 0.105 \text{ эВ}$ коэффициент, который был подобран таким образом, чтобы отношения $\alpha = D/r$ при различных кинетических энергиях атомов меди были приблизительно равны отношениям приведенным в [2].

На исследуемые ячейки накладывались периодические граничные условия. Начальные скорости атомов модельной решетки за исключением одного задавались равной нулю. При достижении возмущения границы ячейки, скорости атомов обнулялись.

Визуализация эффектов осуществлялась в плоскости (111). Вектор скорости исходного атома, т.е. атома, с которого начиналась цепочка столкновений, имел в направлении плотноупакованного ряда наибольшую составляющую, образуя с ним угол θ_0 , благодаря малой нормальной составляющей к плоскости (111), величина которой влияла на получаемые результаты. Малые составляющая скорости нормальные к основному направлению и лежащие в плоскости (111) существенного влияния на результаты не оказывали.

Характер столкновений определяется параметром фокусировки $\Lambda = \theta_n / \theta_{n-1}$, (n – номер столкновения). Как для моноатомного кристалла Cu так и для упорядоченного сплава значения параметра Λ зависели от энергии атома, с которого начиналась цепь столкновений. Если его энергия не превышала 100 эВ, Λ был меньше единицы при любом θ_0 .

Если первый атом имел энергию в диапазоне от, приблизительно, 100 эВ до 130–135 эВ, то параметр Λ мог быть как меньше единицы, так и больше ее. Т.е. могли иметь место как фокусирующиеся, так и краудионные столкновения.

В диапазоне энергий первого атома от 135 эВ до 400 эВ., дефокусировка наблюдалась при достаточно малых углах, столкновения атомов при этом были всегда краудионными, даже при нулевом значении угла θ_0 , см. рис.1.1.

В наших компьютерных экспериментах фокусирующиеся и краудионные столкновения происходили при условии $D/r = \alpha < 1.75$, т.е. верхняя граница параметра была несколько ниже той, что была дана R.H. Silsbee в [1].

В диапазоне энергий от 135 до 240 эВ. в кристалле Cu имел место эффект «увлечения» вакансии движущимся краудионом см. рис.1.2. Этот эффект объясняется тем, что первый атом при данных кинетических энергиях взаимодействует не только со вторым атомом, но и со следующим, в результате чего имеет место отскок начального атома. Этот эффект имел место в кристалле упорядоченного биатомного сплава CuAu, в диапазоне энергий от 138 до 180 эВ.

Энергии выше 400 эВ атомам не сообщались, поскольку это приводило к локальному разрушению модельной решетки.

Общность поведения атомных столкновений в кристаллических решетках моноатомного Cu и упорядоченного сплава CuAu заканчивалась при достижении значений энергии начального атома величины равной, приблизительно, 350 эВ.

В диапазоне энергий от 350 до 400 эВ., в биатомном упорядоченном сплаве CuAu наблюдались эффекты не свойственные кристаллу моноатомного Cu. При значении угла θ_0 порядка 0,044–0,05 радиан, на месте первого и следующего за ним соседа появлялась пара вакансий, вместо одиночной как это происходило в кристалле моноатомного Cu. Соответственно в плотноупакованном ряду появлялись два краудиона. С уменьшением угла θ_0 вакансии разъединялись и удалялись друг от друга на некоторое расстояние, которое увеличивалось по мере уменьшения угла θ_0 , при этом существовала довольно высокая вероятность возникновения третьей вакансии, см. рис. 1.3.

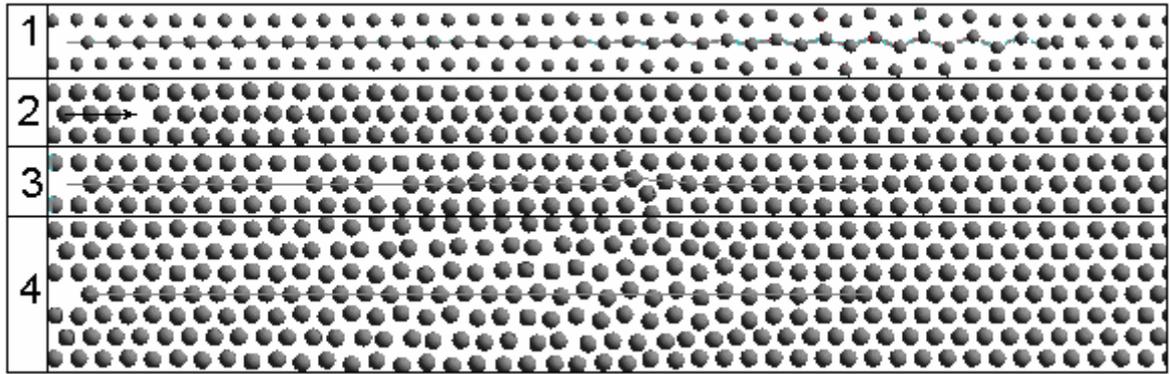


Рис. 1. Сечение плоскостью (111) трехмерной ячейки, моделирующей кристалл упорядоченного сплава CuAu со сверхструктурой $L1_0$, (плоскость, занятая атомами Cu)

Линией обозначено направление атомных столкновений. 1. Дефокусировка столкновений; энергия первого атома $E = 400$ эВ, $\theta_0 = 0,00029$ рад. 2. «Увлечение» вакансии краудионом, перемещение вакансии показано стрелкой $E \approx 138$ эВ., $\theta_0 = 0$ рад. 3. Результат краудионных столкновений в CuAu – три вакансии и три краудиона, $E = 400$ эВ., $\theta_0 = 0,008$. 4. Деформация кристаллической структуры в результате дефокусировки ($E = 400$ эВ, $\theta_0 = 0,012$ рад.).

При энергиях первого атома выше 400 эВ. даже при достаточно малых углах наблюдалась дефокусировка, приводящая к существенной деформации структуры кристаллической решетки см. рис.1.4.

В заключении следует отметить, что компьютерные эксперименты, проведенные методом молекулярной динамики при значениях параметра $D/r = \alpha < 1.75$ для моноатомной кристаллической решетки Cu, дали результаты, совпадающие с полученными в [1]. При большем значении α атомные столкновения атомов Cu в упорядоченном биатомном сплаве CuAu порождают от двух до трех вакансий, расстояния между которыми зависят от угла θ_0 и могут варьироваться от одного до нескольких десятков межатомных расстояний. В моноатомном кристалле краудионные столкновения порождают только одну вакансию. Обнаружен эффект «увлечения» вакансии краудионом в некотором диапазоне энергий начального атома.

Список литературы

1. Silsbee, R.H. // Journal of Applied Physics, v. 28, p. 1246 (1957).
2. Гарбер Р.И. Федоренко А.И. // УФН, т. 83, вып. 3, с. 185 (1964).
3. Iskandarov A.M., Medvedev N.N., Zakharov P.V., Dmitriev S.V. // Computational Materials Science, v 47, p. 429 (2009).
4. Горлов *Н.В.* Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B и $A_3B(C)$. Дисс. на соискание уч. степ. к. ф.-м. н. Томск. 1987. 214 с.