

05

## Механизм взаимной диффузии вблизи межфазной границы в двумерной системе Ni–Al

© Г.М. Полетаев, М.Д. Старостенков

Алтайский государственный технический университет, Барнаул

E-mail: genphys@agtu.secna.ru

В окончательной редакции 31 января 2003 г.

Методом молекулярной динамики исследуется механизм взаимной диффузии вблизи межфазной границы в двумерной системе Ni–Al. Обнаружено, что ведущий механизм диффузии заключается в коррелированных скачках атомов „по вакансиям“ вблизи ядер дислокаций несоответствия.

Многие исследования показывают, что в металлических системах немаловажную, а порой и ведущую, роль в процессе диффузии, помимо точечных дефектов, играют такие дефекты структуры, как дислокации и дислокационные комплексы, границы зерен и границы фаз и т.д. [1–3]. Однако механизмы диффузии с участием дислокаций на данный момент до конца не изучены. Проведение соответствующих экспериментов на практике весьма затруднительно, так как предполагает изучение динамики процесса на атомном уровне. Одним из способов решения этой проблемы является использование метода компьютерного моделирования.

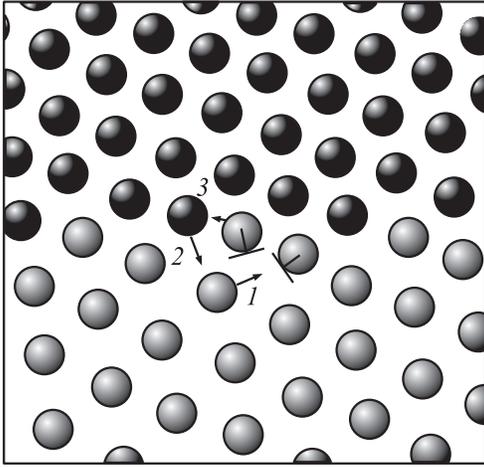
Для изучения механизма взаимной диффузии в настоящей работе использовался метод молекулярной динамики. В качестве металлической системы была взята система Ni–Al, что связано в первую очередь с высокой скоростью взаимной диффузии в этой системе при повышенных температурах. Моделирование диффузии проводилось в двумерном приближении. Взаимодействия атомов описывались парными центральными потенциалами межатомного взаимодействия Морза. Параметры потенциалов были взяты из работы [4]. Радиус действия потенциалов ограничивался расстоянием  $8 \text{ \AA}$ , что соответствует 4 координационным сферам в двумерном кристалле Al и 5 в кристалле Ni при температуре 0 К. Расчетная ячейка в экспериментах содержала при-

мерно 3000 атомов. Этого количества вполне достаточно для изучения микромеханизма диффузии в двумерной системе: влияние границ расчетной ячейки на параметры процесса, как показали предварительные эксперименты, наблюдается лишь при размерах ячейки порядка 5–6 nm (20–25 межатомных расстояний). Кристаллические фазы задавались с гексагональной упаковкой. Расчетная ячейка имела прямоугольную форму и содержала две контактирующие кристаллические фазы Ni и Al. Граничные условия задавались по одной оси (вдоль межфазной границы) периодические (межфазная граница представлялась в виде протяженного периодического дефекта), по другой — гибкие (крайним атомным рядам позволялось смещаться как единому целому). Наложение гибких граничных условий позволяло расчетной ячейке менять объем вследствие изменения температуры и давления. Построение стартовой структуры расчетной ячейки включало: построение конфигурации расчетной ячейки, первичную динамическую релаксацию до стабилизации кинетической энергии, сверхбыстрое охлаждение до минимально низкой температуры.

После динамической релаксации расчетных ячеек на межфазной границе наблюдались дислокации несоответствия, ориентированные сразу в двух из трех плотноупакованных направлений. Существование дислокаций парами — характерная особенность дислокаций в двумерных гексагональных кристаллах. Чаще всего такая пара имеет общее ядро ввиду энергетической выгоды. Парность обусловлена высоким порядком осевой симметрии: сдвиг в одном из плотноупакованных направлений вызывает смещение сразу двух плотноупакованных атомных рядов, угол между которыми составляет  $60^\circ$ .

Эксперимент по изучению механизма взаимной диффузии проводился при температурах, близких к температуре плавления Al. Из предварительных компьютерных экспериментов было найдено, что температура плавления двумерного Al в данной модели имеет значение  $\sim 1000$  K.

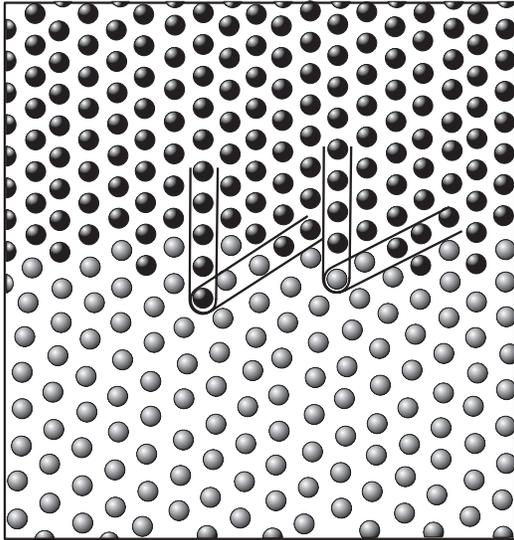
Из наблюдения динамики атомной структуры в процессе эксперимента было обнаружено, что акт диффузии до температуры плавления Al состоит в основном из комбинации коррелированных скачков вакансии вблизи ядра дислокации несоответствия, в результате которых атом Al занимает прежнее место атома Ni (рис. 1). Пустоты в ядрах дислокаций в процессе тепловых колебаний атомов могут вести себя подобно вакансиям при больших отклонениях соседних



**Рис. 1.** Пример акта диффузии на межфазной границе в двумерной системе Ni–Al. Цифрами указана возможная очередность атомных перемещений. Атомы Ni черные, Al — серые.

атомов. В такие моменты увеличивается вероятность занятия одним из соседних атомов прежнего положения вакансии. Скачки атомов „по вакансиям“ происходят преимущественно вдоль плотноупакованных рядов, поскольку такой скачок имеет относительно меньшую энергию активации. Циклический обменный механизм с участием вакансии (рис. 1) может включать и более трех атомов, но во всех случаях процесс активизируется вблизи областей локальной аморфизации (областей с нарушенной кристалличностью).

Продвижение диффундирующих атомов в фазу того или иного компонента связано с перемещением свободного объема, в данном случае в сторону Al (как более пластичного). В основном это обусловлено размерным несоответствием межатомных связей Ni–Al и Al–Al, вследствие чего появляются искажения решетки. Вместе с этим наблюдается „прорастание“ дислокаций несоответствия в объем Al (рис. 2). Вторым фактором продвижения свободного объема может служить полиморфизм, распространяющийся в глубь более пластичного



**Рис. 2.** Перемещение свободного объема в глубь фазы Al в процессе диффузии вследствие „прорастания“ дислокаций несоответствия. Оборванные атомные ряды, образующие дислокации несоответствия, выделены линиями.

материала и создающий искажения решетки на фронте своего распространения, который, по сути, является межзеренной границей.

При исследовании влияния на скорость взаимодиффузии взаимной ориентации фаз Ni и Al было обнаружено, что, помимо плотности дислокаций несоответствия, на скорость диффузии вблизи межфазной границы также оказывает влияние ориентация фазы Ni относительно границы. Как оказалось, взаимодиффузия вблизи границы протекает интенсивней, когда у приграничных атомов Ni больше соседних атомов Al. По-видимому, это связано с подвижностью приграничных атомов Ni. В случае, когда атомы Ni на межфазной границе имеют больше соседних атомов Al, они, по всей видимости, находятся в более „широкой“ потенциальной яме.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 02-02-17875.

## Список литературы

- [1] *Бокштейн Б.С.* Диффузия в металлах. М.: Металлургия, 1978. 248 с.
- [2] *Гегузин Я.Е.* Диффузионная зона. М.: Наука, 1979. 343 с.
- [3] *Глейтер Г., Чалмерс Б.* Большеугловые границы зерен / Пер. с англ. М.: Мир, 1975. 376 с.
- [4] *Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф.* и др. // ФММ. 1984. Т. 58. № 2. С. 336–343.