

05

Структурные изменения тетраэдров дефектов упаковки при поглощении точечных дефектов

© Г.М. Полетаев, М.Д. Старостенков

Алтайский государственный технический университет, Барнаул
E-mail: gmpoletaev@mail.ru, genphys@mail.ru

Поступило в Редакцию 14 апреля 2008 г.

Методом молекулярной динамики исследован механизм структурной перестройки тетраэдров дефектов упаковки (ТДУ) при поглощении точечных дефектов. При последовательном поглощении идеальным ТДУ вакансий происходят следующие трансформации: образование ступеньки на одной из граней ТДУ, „смена знака“ ступеньки при достижении ею середины грани, образование ТДУ с усеченной вершиной, формирование идеального ТДУ. При поглощении межузельных атомов этапы трансформации имеют противоположную последовательность.

PACS: 61.72.Bb

Исследования изменений физических свойств материалов, подвергнутых радиационному воздействию, а также проблема воздействия радиации на структуру материалов являются 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. Степень радиационного упрочнения зависит в первую очередь от конечной дефектной структуры облучаемого металла, т.е. концентрации, размеров и типов скоплений точечных дефектов, являющихся барьерами на пути движения дислокаций [1–5]. В настоящее время выяснено, что упрочнение в большей степени обусловлено кластерами вакансионного и межузельного типов размером до ~ 5 nm [1–5]. К ним относят дислокационные петли, тетраэдры дефектов упаковки и поры. Для развития представлений о природе радиационного упрочнения и сопутствующих явлений необходимо детальное исследование дефектообразования, в частности агрегатизации точечных дефектов, в радиационно поврежденных металлах.

Возросшие в последние десятилетия возможности электронной микроскопии позволили достоверно установить, что небольшие вакансионные кластеры в ГЦК-металлах являются в основном тетраэдрами дефектов упаковки [4]. Грани тетраэдра дефектов упаковки (ТДУ) ориентированы вдоль плоскостей типа $\{111\}$ и являются дефектами упаковки, а ребра ориентированы вдоль направлений $\langle 110 \rangle$ и представляют собой вершинные дислокации с вектором Бюргерса $1/6 \langle 110 \rangle$ [4,6]. ТДУ образуются во всех ГЦК-металлах [7], однако их критический размер, при котором энергетически более выгодными становятся вакансионные диски, существенно зависит от энергии образования дефекта упаковки в данном металле [6]. В связи с этим первые ТДУ наблюдались в металлах с невысокой энергией дефекта упаковки (Au, Ag, Cu и т.д.) [6]. Например, в Au вакансионные диски наблюдаются преимущественно выше определенного размера — 230 \AA , в то время как ТДУ — до размера 200 \AA [6]. Следует заметить, что ТДУ образуются не только в результате радиационного повреждения, но и быстрого охлаждения от высоких температур, пластической деформации [7]. ТДУ являются эффективными стопорами для движущихся дислокаций [1–7].

Одним из дискуссионных вопросов, связанных с ТДУ, является вопрос, касающийся механизмов трансформации и роста ТДУ при поглощении вакансий или межузельных атомов. В работе [6] делается предположение, а в работе [8] с помощью электронной микроскопии подтверждено, что в процессе роста ТДУ происходит перемещение ступеньки на одной из его граней. Настоящая работа посвящена детальному исследованию методом молекулярной динамики механизма трансформации ТДУ при последовательном поглощении точечных дефектов в ГЦК-металлах Cu, Au, Ag.

Межатомные взаимодействия описывались с помощью многочастичных потенциалов, взятых из работы [9]. Радиус действия потенциалов ограничивался 5 координационными сферами. Расчетный блок идеального ГЦК-кристалла содержал 27 000 атомов. На границы блока были наложены периодические граничные условия.

Для исследования взаимодействия ТДУ с точечными дефектами в расчетном блоке были созданы два типа ТДУ: идеальный и со ступенькой на одной из граней тетраэдра. Идеальный ТДУ создавался следующим образом. Сначала в плоскости $\{111\}$ удалялись атомы, образующие треугольник (чаще всего рассматривался треугольник, включающий 66 вакансий с длиной ребра в 11 межплоскостных расстояний). Другими словами, в расчетном блоке создавался вакансионный диск треугольной формы. При данных размерах вакансионные диски энергетически менее выгодны, чем ТДУ, поэтому созданный вакансионный диск без дополнительной термоактивации в течение очень короткого времени перестраивался в правильный ТДУ. Механизм такой трансформации описан в [6], он заключается в расщеплении дислокационной петли Франка. При этом, как видно из рис. 1, *a*, происходило последовательное смещение (оседание) групп атомов, имеющих форму правильного треугольника, из плоскостей, параллельных плоскости вакансионного диска, по направлению к нему. ТДУ со ступенькой создавался аналогично, но с тем отличием, что изначальный треугольный вакансионный диск имел неполный внешний ряд вакансий вдоль одной из сторон треугольника (рис. 1, *b*). В результате трансформации такой диск перестраивался в ТДУ со ступенькой.

В процессе молекулярно-динамического эксперимента в широком интервале температур ($0.4T_{melt} - T_{melt}$, где T_{melt} — температура плавления) неоднократно наблюдалось изменение положения ступеньки на ТДУ: из положения на грани тетраэдра возле одной вершины она перестраивалась в положение у другой вершины, как правило, на той же грани (рис. 2, *a*). Энергия активации подобной переориентации ступеньки, по всей видимости, имеет невысокое значение. Как видно на рис. 2, *a*, переориентация ступеньки происходит в результате согласованных смещений атомов от одной вершины к другой вдоль грани ТДУ.

Помимо переориентации от одной вершины к другой наблюдался еще один тип трансформации ступенек, который в настоящей работе был назван „сменой знака“ ступеньки. Этот вид трансформации наблюдался только тогда, когда ступенька располагалась посередине

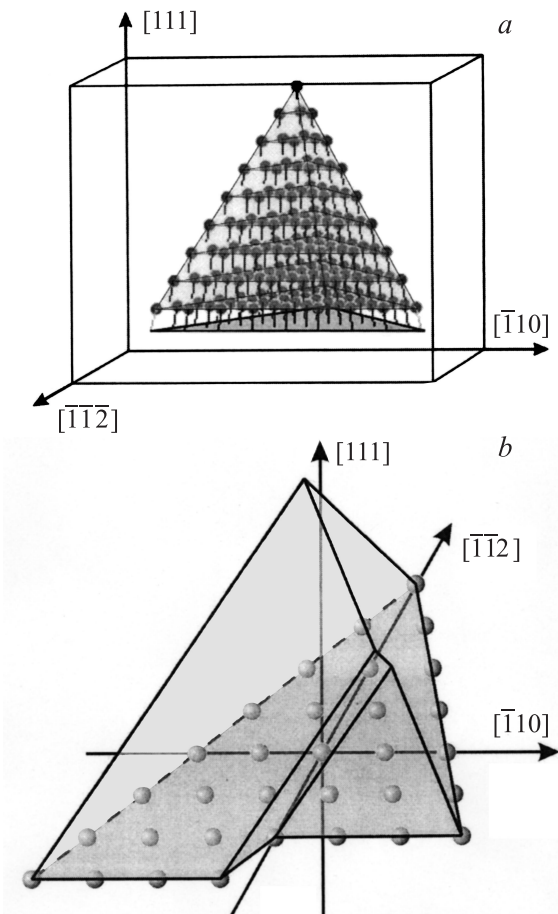


Рис. 1. Образование ТДУ из треугольного вакансионного диска. *a* — смещения (показаны отрезками) групп атомов треугольной формы из соседних плоскостей по направлению к вакансионному диску. Показаны только те атомы, которые имеют энергию, значительно отличающуюся от энергии атомов в идеальном кристалле. *b* — схема создания ТДУ со ступенькой. Серым цветом выделен изначальный треугольный вакансионный диск с неполным внешним рядом вакансий вдоль одной из сторон треугольника. Кружками показаны удаленные атомы в плоскости $\{111\}$.

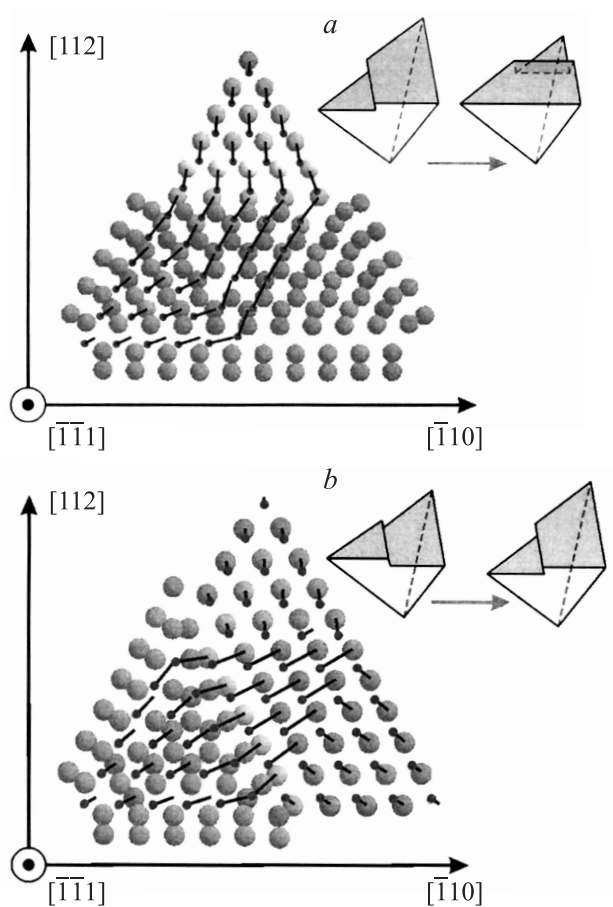


Рис. 2. Трансформации ступенек на ТДУ: *a* — переориентация ступеньки от одной вершины к другой; *b* — „смена знака“ ступеньки. Показаны только те атомы, которые имеют энергию, значительно отличающуюся от энергии атомов в идеальном кристалле.

границы ТДУ. Он заключался в том, что если подъем на ступеньке был со стороны вершины, а спуск — со стороны противоположной грани, то при „смене знака“, наоборот, ступенька имела подъем со стороны грани, а спуск — со стороны вершины, причем чаще всего

не той, со стороны которой сначала был подъем (рис. 2, *b*). При данной трансформации объем ТДУ существенно не изменялся, процесс определялся, по-видимому, уменьшением эффективной длины ядер вершинных дислокаций, являющихся ребрами ТДУ.

При исследовании взаимодействия ТДУ с одиночной вакансией в расчетный блок вблизи ТДУ вводилась вакансия и проводился компьютерный эксперимент в течение 100–200 ps при температуре $0.8T_{melt}$, после которого расчетный блок охлаждался до 0 К. Исследования проводились с помощью визуализаторов распределения потенциальной энергии и атомных смещений. Вакансии вводились в расчетный блок в различных положениях относительно ТДУ.

Вакансия, как было выяснено, при объединении с правильным ТДУ во всех случаях мигрировала к одному из ребер ТДУ, т.е. в ядро вершинной дислокации, и в дальнейшем совершала перескоки только вдоль данного ребра (ядра дислокации). Правильный ТДУ при этом не испытывал трансформации и сохранял прежнюю конфигурацию. Вакансия не мигрировала внутрь ТДУ, оставаясь в процессе всего эксперимента на его ребре.

При взаимодействии вакансии с ТДУ, который содержал ступеньку, вакансия мигрировала в ТДУ и провоцировала его трансформацию, в результате которой ступенька смещалась на одно межплоскостное расстояние, увеличивая объем ТДУ. Если ступенька смещалась от вершины дальше середины грани, то такая конфигурация становилась энергетически невыгодной (из-за относительно высокой эффективной длины ядер вершинных дислокаций) и происходила „смена знака“ ступеньки.

Межузельные атомы мигрируют значительно интенсивнее, чем вакансии, а этапы трансформации ТДУ при их поглощении, имеют, очевидно, обратную направленность. Поэтому для выяснения последовательности этапов роста ТДУ в расчетный блок вблизи ТДУ вводились последовательно межузельные атомы. При этом следующий межузельный атом вводился после того, как предыдущий поглощался ТДУ и вызывал его трансформацию.

Как показали эксперименты, при поглощении ТДУ до четырех межузельных атомов ступенька на грани ТДУ не образовывалась. В этом случае одна из вершин тетраэдра становилась усеченной. Ступенька образовывалась при поглощении правильным ТДУ более четырех межузельных атомов, при этом она имела спуск со стороны

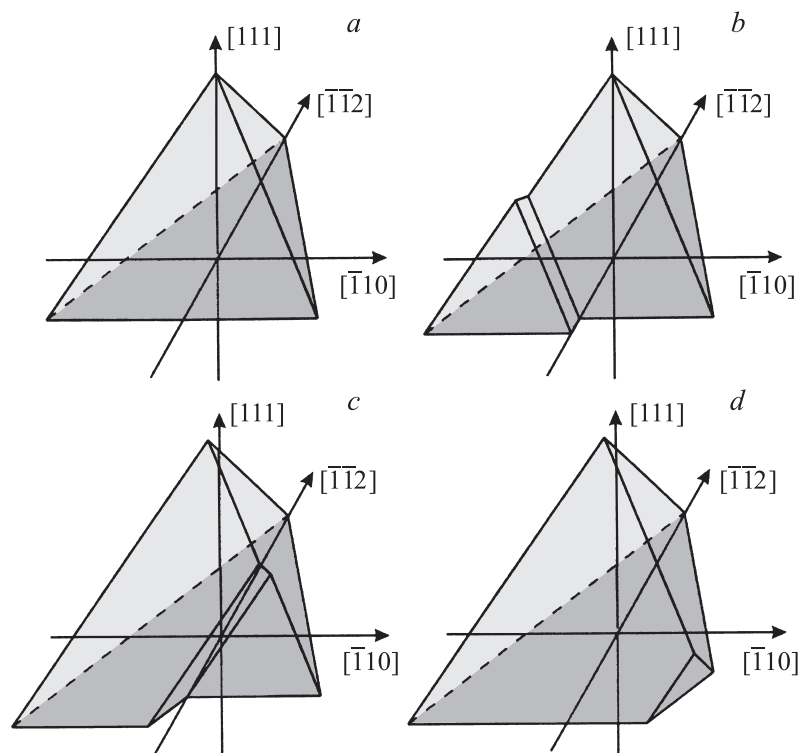


Рис. 3. Основные этапы трансформации ТДУ при поглощении вакансий: a — $0-2$ вакансии, b — $3-m/2$, c — $m/2 - (m-4)$, d — $(m-3) - m$; m — число атомных рядов на грани первоначального ТДУ.

вершины. В процессе эксперимента, как говорилось выше, могла произойти переориентация ступеньки, а в том случае, когда ступенька смещалась, в результате поглощения межузельных атомов, от вершины дальше середины грани, происходила „смена знака“ ступеньки, после чего ступенька со стороны вершины имела уже подъем. Когда для образования идеального ТДУ было достаточно поглощения двух межузельных атомов, ТДУ принимал форму правильного тетраэдра, а две „лишние“ вакансии мигрировали к двум различным ребрам ТДУ и перемещались только вдоль этих ребер (ядер вершинных дислокаций).

При поглощении вакансий этапы трансформации ТДУ имеют противоположную последовательность (рис. 3). Таким образом, можно утверждать, что при поглощении идеальным ТДУ до двух вакансий существенной трансформации ТДУ не происходит — вакансии закрепляются на вершинных дислокациях и мигрируют вдоль них. В случае добавления от трех до $(m - 4)$ вакансий, где m — число атомов на ребре первоначального ТДУ (или число атомных рядов на грани ТДУ), на грани ТДУ образуется ступенька, которая в начальный момент роста имеет подъем со стороны вершины (рис. 3, *b*), а при достижении ею середины грани „меняет знак“ и имеет со стороны вершины спуск (рис. 3, *c*). Когда число поглощенных вакансий находится в диапазоне от $(m - 3)$ до m , ТДУ принимает форму тетраэдра с усеченной вершиной (рис. 3, *d*). При поглощении $(m + 1)$ вакансий ТДУ становится идеальным.

Список литературы

- [1] Курсанов В.В., Суворов А.Л., Трушин Ю.В. Процессы радиационного дефектообразования в металлах. М.: Энергоатомиздат, 1985. 272 с.
- [2] Rodney D., Martin G. // Physical Review B. 2000. V. 61. N 13. P. 8714 (12).
- [3] Wirth B.D., Bulatov V.V., Diaz de la Rubia T. // Journal of Engineering Materials and Technology. 2002. V. 124. N 3. P. 329–334.
- [4] Matsukawa Y., Zinkle S.J. // Journal of Nuclear Materials. 2004. V. 329–333. P. 919–923.
- [5] Szelestey P., Patriarca M., Kaski K. // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2005. N 13. P. 541–551.
- [6] Хирт Д., Ломе И. Теория дислокаций / Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
- [7] Kiritani M., Satoh Y., Kizuka Y., Arakawa K., Ogasawara Y., Arai S., Shimomura Y. // Philosophical Magazine Letters. 1999. V. 79. N 10. P. 797–804.
- [8] Arakawa K., Arai Sh., Orihara H., Ono K., Kiritani M. // Journal of Electron Microscopy. 2002. V. 51. P. S225–S229.
- [9] Cleri F., Rosato V. // Physical Review B. 1993. V. 48. N 1. P. 22–33.