

УДК 548.4

© 1992

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА АТОМНОМ УРОВНЕ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЯДЕР ДИСЛОКАЦИЙ

В. С. Бойко, Т. И. Мазилова

Проведено компьютерное моделирование на атомном уровне контактного взаимодействия ядер смешанных дислокаций типа $a/2$ (111) в решетке вольфрама. В случае дислокаций разных знаков, лежащих в одной плоскости скольжения, наблюдаются их сближение, аннигиляция ядер и начальный этап генерации аннигиляционного излучения звука. Особенностью процесса является скачкообразный характер движений дислокаций. В течение интервала времени $\sim 10^{-13}$ с дислокация покинется, а затем с большой скоростью преодолевает 1, изредка 2 межатомных расстояния.

При взаимодействии дислокаций одного знака отсутствуют связанные состояния у ядер дислокаций, находящихся в соседних параллельных плоскостях скольжения. Оценка напряжений $\sigma_{пр}$, необходимых для прохождения дислокаций над дислокацией того же знака в параллельной плоскости скольжения, отстоящей на одном межплоскостном расстоянии, по данным компьютерного эксперимента составляет $\sigma_{пр} \approx 0.275 \mu$ (μ — модуль сдвига). Это примерно в 5 раз превышает оценку $\sigma_{пр}$, полученную согласно континуальной теории.

Неупругая деформация кристаллов в значительной степени определяется контактным взаимодействием дефектов решетки. Последовательное описание такого взаимодействия в рамках континуальной теории встречает принципиальные трудности, которые можно обойти с помощью компьютерного моделирования. Что касается линейных дефектов — дислокаций, — то их контактное взаимодействие с точечными дефектами детально изучено этой методикой в ряде работ (подробнее см., например, [1]) как в случае покоящегося, так и в случае движущегося ядра [2, 3]. Контактное взаимодействие дислокации со свободной поверхностью (выход ядра дислокации на поверхность) рассмотрено в [4]. В последнее время начато исследование контактного взаимодействия ядер дислокаций с другим типом поверхностных дефектов — границами зерен [5–7]. Контактное взаимодействие ядер линейных дефектов между собой — дислокаций разных знаков (их аннигиляция) — рассмотрено в [8] для двойникующих дислокаций. Обнаружено существование радиуса безусловной аннигиляции — такого расстояния между геометрическими центрами дислокаций, после достижения которого происходят потеря устойчивости решетки между ними и ее практически одновременное залечивание во всем объеме, разделяющем сближающиеся центры дислокаций.

Вопрос об устойчивости решетки, содержащей предельные плотности дислокаций, аналитически рассмотрен в [9]. Наличие энергии в ядрах дислокаций должно приводить при предельных их плотностях 10^{12} – 10^{13} см⁻² к потере устойчивости решетки. Отмечается, что точная оценка требует атомистического рассмотрения. Существование конечного радиуса безусловной аннигиляции может дать полезную информацию для аналитических расчетов процесса аннигиляции дислокаций путем выбрасывания перегибов навстречу друг другу [10, 11].

Целью данной работы было компьютерное моделирование на атомном уровне процесса аннигиляции дислокаций противоположных знаков общего

типа — смешанных, упругое поле которых имеет как сдвиговые, так и нормальные компоненты тензора напряжений. По сравнению с [8] ситуация приближена к реальной — поле скоростей предварительно не вводилось; ожидалось, что встречное движение дислокаций должно начаться спонтанно в результате взаимодействия упругих полей дислокаций.¹ Методика компьютерного эксперимента и его предварительные результаты содержатся в [12]. Использовался метод молекулярной динамики. Микрорешетка содержала 1280 атомов. Рассмотрена ОЦК решетка вольфрама с потенциалом Джонсона. Дислокации смешанные, типа $a/2 \langle 111 \rangle$, с периодом идентичности 2 атомные плоскости (110). Сделана попытка рассмотреть процесс аннигиляции дислокаций, лежащих не только в одной, но и в соседних плоскостях скольжения. Рассмотрено также взаимодействие одноименных дислокаций.

Вначале изучалась аннигиляция смешанных дислокаций разных знаков, лежащих в одной плоскости скольжения на расстоянии 36 \AA $x \approx 9r_c$ (r_c — радиус ядра дислокации; согласно компьютерным расчетам [13], в вольфраме $r_c \approx 4 \text{ \AA}$). В начальный момент атомы покоятся. Первым приобретают заметные скорости атомы, составляющие ядра дислокаций. Особенностью процесса является скачкообразный характер движения дислокаций. В течение интервала времени $\sim 10^{-13}$ с дислокация покоится, а затем с большой скоростью (несколько превышающей скорость поперечных звуковых волн) преодолевает 1, изредка 2 межатомных расстояния. Следить за ее перемещением помогает атом с повышенной энергией на конце лишней полуплоскости. По-видимому, в ядрах дислокаций в течение времени порядка обратной дебаевской частоты происходит накопление энергии, необходимой для преодоления барьера Пайерлса. После его преодоления дислокация и проскакивает 1 или (как бы по инерции) 2 межатомных расстояния. Дискретность решетки приводит, как видим, и к дискретному во времени, скачкообразному перемещению.

Как правило, во всех книгах, посвященных физике дислокаций, процесс аннигиляции дислокаций разных знаков построен на основе умозрительных соображений. Поэтому мы приведем подробные рисунки этого процесса, полученные на основании данных компьютерного экс-

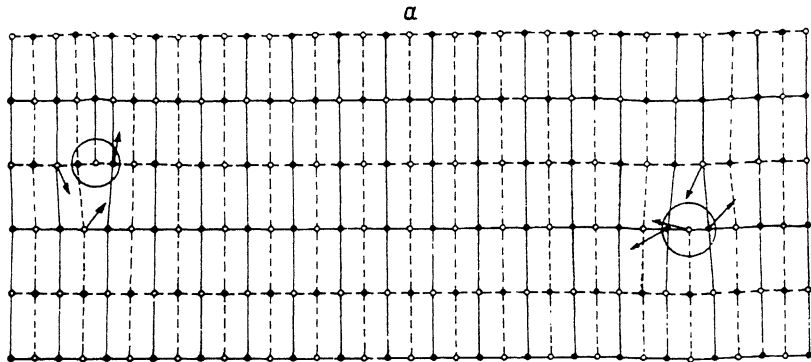


Рис. 1. Аннигиляция смешанных дислокаций разных знаков типа $a/2 \langle 111 \rangle$ в решетке вольфрама, лежащих в одной плоскости скольжения, по данным компьютерного моделирования.

a — через $3.96 \cdot 10^{-13}$ с после начала процесса, b — через $13.27 \cdot 10^{-13}$ с, $в$ — через $19 \cdot 10^{-13}$ с, $г$ — через $25.7 \cdot 10^{-13}$ с аннигиляция завершена и решетка полностью восстанавливает идеальную структуру.

¹ Спонтанное движение дислокации наблюдалось в [4] при моделировании процесса выхода дислокации на поверхность — процесса, аналогичного (в континуальном приближении) аннигиляции в неограниченной среде.

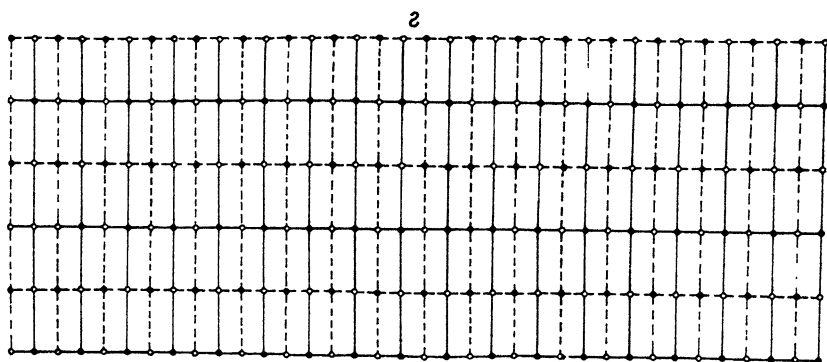
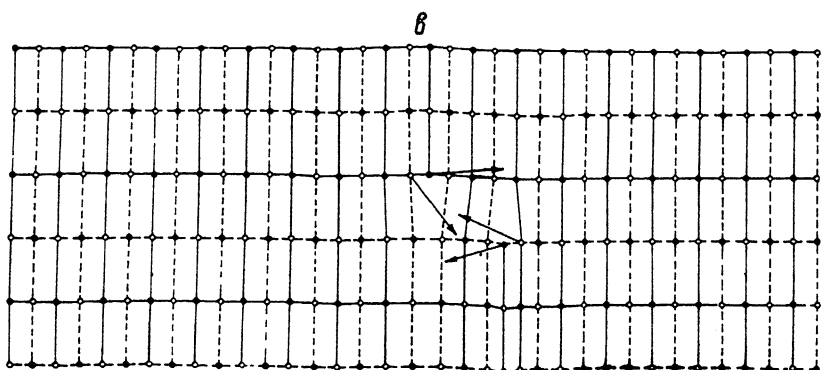
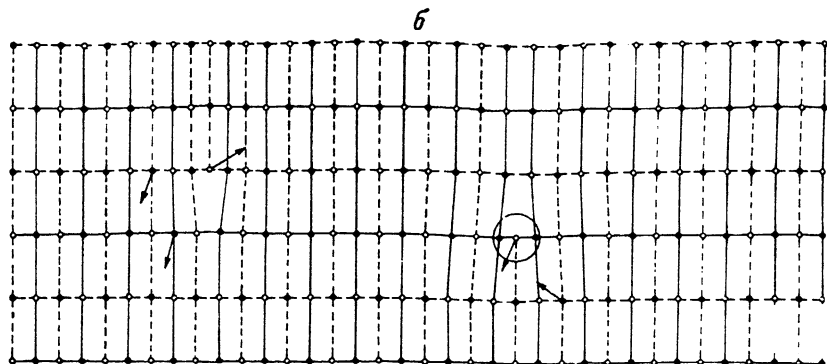


Рис. 1 (продолжение).

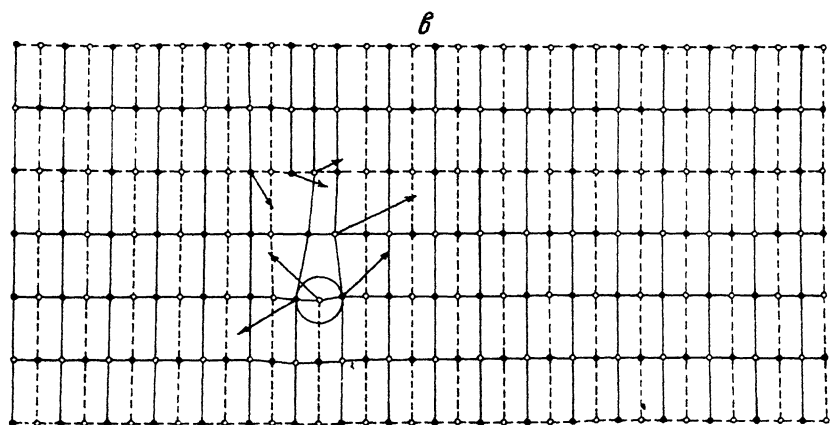
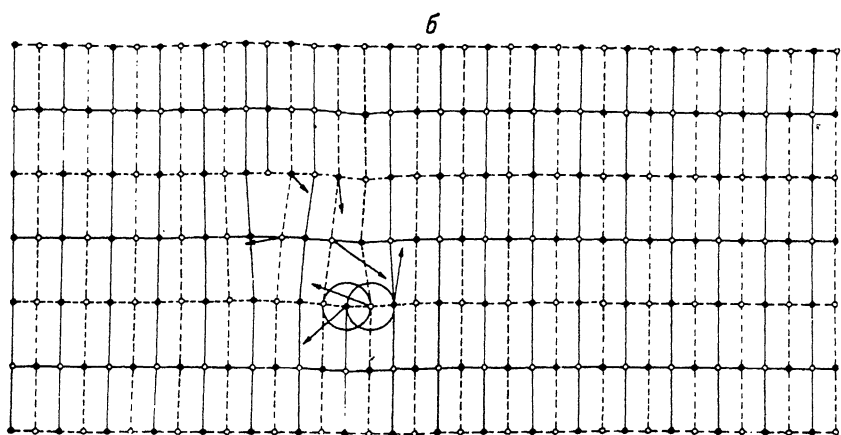
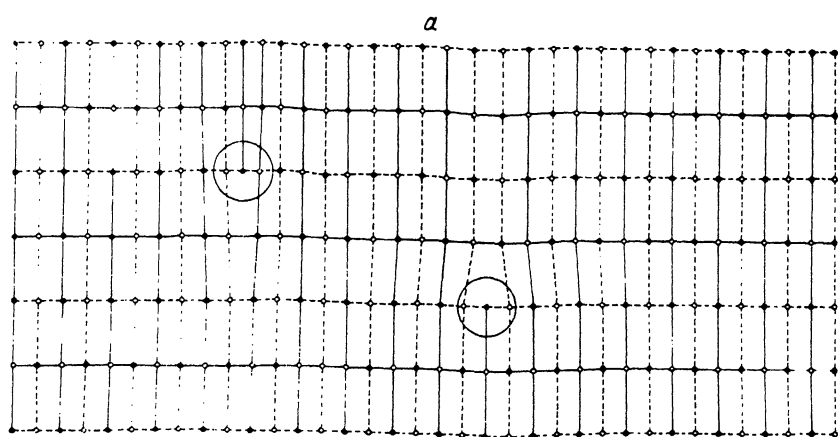


Рис. 2. Аннигиляция смешанных дислокаций разных знаков типа $a/2 \langle 111 \rangle$ в решетке вольфрама, лежащих в соседних параллельных плоскостях скольжения. Исходное расстояние между ядрами по горизонтали $5a\sqrt{2}/2 \approx 11 \text{ \AA}$. *a* — через $0.1 \cdot 10^{-13}$ с после начала, *б* — через $2.97 \cdot 10^{-13}$ с, *в* — через $7.92 \cdot 10^{-13}$ с; аннигиляция завершается в течение $8.1 \cdot 10^{-13}$ с.

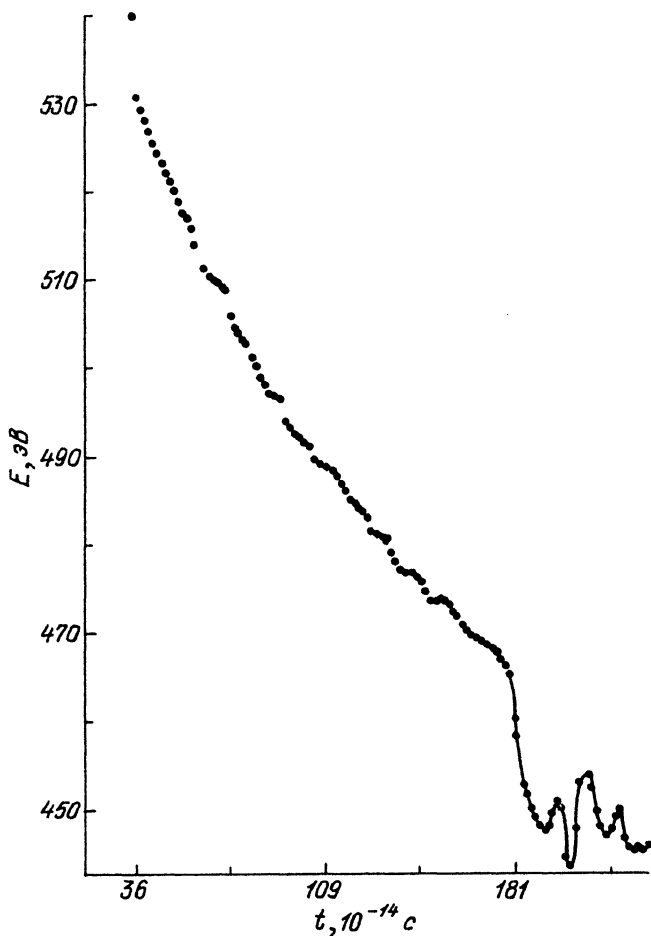
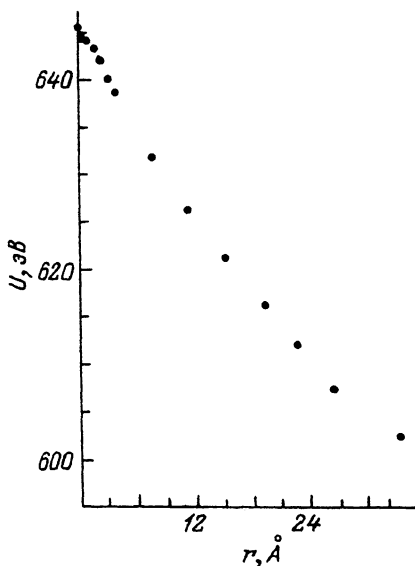


Рис. 3. Изменение энергии микрокристалла во время сближения и аннигиляции дислокаций (процесс представлен на рис. 1).

перимента. На рис. 1 — аннигиляция дислокаций, лежащих в одной плоскости скольжения, на рис. 2 — в двух соседних параллельных плоскостях скольжения. На плоскость рисунка спроектированы две соседние атомные плоскости типа (110). Атомы одной из плоскостей изображены черными кружками, атомы другой — белыми. Большой кружок, проведенный вокруг атома на конце лишней полуплоскости, соответствует энергии 0.4 эВ. Энергии других атомов существенно меньше и они не показаны. Стрелки показывают направления скоростей атомов. Максимальные скорости $(7 \div 8) \times 10^4$ см/с. Скорости значительны лишь для атомов в ядре дислокации. Исходное расстояние между ядрами $16a\sqrt{2}/2 \approx 36$ Å. Время аннигиляции дислокаций разных плоскостей в 1.5 раза превышает время аннигиляции дислокаций, лежащих в одной плоскости, при одинаковом расстоянии между ними. В последнем случае наблюдается картина, когда ядра дислокаций исчезли, а в разделявшей их плоскости, там, где дислокации оставались друг под другом после сближения, возникли точечные дефекты.

Весьма интересным является анализ процессов после завершения аннигиляции. Согласно [14], при взаимном захвате разноименных дислокаций на расстоянии $2-3 r_c$ происходит слияние ядер, а освобождающейся энергии хватает на отрыв и диффузионное расползание избыточных вакансий или межузельных атомов.

Рис. 4. Изменение энергии микрокристаллита, содержащего две дислокации одного знака, лежащие в соседних параллельных плоскостях, в зависимости от расстояния по горизонтали между центрами их ядер.



Если цепочки вакансий, возникающие после аннигиляции дислокаций, лежащих в разных плоскостях скольжения, не успеют диффузионно расползтись, то они могут стать зародышами пор.

Если проследить за изменением энергии микрокристаллита, в котором происходит аннигиляция дислокаций разных знаков (рис. 3) то мы обнаружим волнообразное падение энергии системы (каждая «волна» обусловлена преодолением очередного барьера Пайерлса). После окончания аннигиляции (через $\sim 1,9 \cdot 10^{-12}$ с) имеют место колебания энергии системы (по существу ее упругой энергии), что может вызвать генерацию звука, теоретически рассмотренную в [15] и экспериментально обнаруженную в [16].

При рассмотрении взаимодействия одноименных дислокаций главное внимание было уделено случаю расположения таких дислокаций в параллельных плоскостях скольжения. Наиболее интересной особенностью такого взаимодействия в континуальном приближении является отталкивание между дислокациями на расстояниях $r \gg h$ (h — расстояние по вертикали между параллельными плоскостями скольжения) и притяжение при $r < h$. Если одноименные дислокации расположены друг над другом, то возникает связанное состояние. В результате этого намечается тенденция к формированию стенок дислокаций, разбивающих кристалл на разориентированные блоки. Вообще говоря, было не ясно, сохранится ли такой характер взаимодействия одноименных дислокаций при $h \sim a$ (a — межплоскостное расстояние).

В компьютерном эксперименте проводилось «измерение» энергии системы в зависимости от расстояния между геометрическими центрами дислокаций. Оказалось, что при $h = a$ происходит монотонное повышение энергии системы по мере уменьшения r , связанное состояние отсутствует (рис. 4). Оценка напряжений, необходимых для прохождения одной дислокации над другой $\sigma_{пр}$ при $h = a$, используя данные компьютерного эксперимента, дает величину $\sigma_{пр} \approx 0,275\mu$ (μ — модуль сдвига). Оценка этой же величины, согласно континуальной теории [14], дает $\sigma_{пр} \approx 0,050\mu$. По мере роста h величина $\sigma_{пр}$ уменьшается. Оценка на основании данных моделирования для $h = 2a$ дает $\sigma_{пр} = 0,131\mu$.

Следует ожидать, что при $h \geq r_c$ возникнет связанное состояние двух одноименных дислокаций в позиции друг над другом. Однако размеры используемого нами микрокристаллита не позволяют провести соответствующие компьютерные эксперименты и уточнить значение h , начиная с которого это будет происходить. На основании полученных результатов можно считать, что модель большеугловой границы зерен в виде плотной стенки дислокаций со слившимися ядрами носит лишь иллюстративный характер. Реально возникнуть в кристалле в результате взаимного захвата ядер такая стенка не может (по крайней мере для дислокации исследованного типа).

В заключение пользуемся случаем выразить благодарность В. Д. Нацки и С. В. Лубенцу за обсуждение результатов.

Список литературы

- [1] Кирсанов В. В., Орлов А. Н. // УФН. 1984. Т. 142. № 2. С. 219—264.
 [2] Клявин О. В., Лиходеев Н. П., Орлов А. Н. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 11. С. 3388—3396.
 [3] Бакенов А. С., Кирсанов В. В. // ФММ. 1986. Т. 62. № 2. С. 241—247.
 [4] Бойко В. С., Кириллов В. А. // Вопросы атомной науки и техники. Серия ФРП и РМ. 1983. № 5 (28). С. 83—85.
 [5] Бойко В. С., Сидоренко И. Н. // ФММ. 1989. Т. 67. № 3. С. 444—450.
 [6] Pestman V. J., de Hosson S. Th. M., Vitek V., Schapink F. W. // Scripta Metall. 1989. V. 23. N 8. P. 1431—1436.
 [7] Бойко В. С., Сидоренко И. Н., Фельдман Э. П., Юрченко В. М. // ФММ. 1991. № 7. С. 105—113.
 [8] Бойко В. С. // Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ. Л., 1980. С. 156—177.
 [9] Cotterill R. M. S. // Phys. Lett. 1977. V. 60A. N 1. P. 61—62.
 [10] Владимиров В. И., Кусов А. А. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 4. С. 1211—1214.
 [11] Мартисов М. Ю., Романов А. Е. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 6. С. 1885—1887.
 [12] Бойко В. С., Мазилова Т. И. // Вопросы атомной науки и техники. Серия ФРП и РМ. 1987. № 1 (39). С. 48—49.
 [13] Бойко В. С., Гарбер Р. И., Мельников М. В., Петров Н. Н., Соловьев А. В. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 2. С. 534—537.
 [14] Орлов А. Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. М., 1983. 144 с.
 [15] Нацик В. Д., Чишко К. А. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 11. С. 3126—3132.
 [16] Бойко В. С., Гарбер Р. И., Кривенко Л. Ф. // ФТТ. 1974. Т. 16. № 4. С. 1233—1235.

Харьковский физико-технический институт
АН Украины

Поступило в Редакцию
13 ноября 1991 г.
В окончательной редакции
11 марта 1992 г.