

УДК 53.8.013.54 8.4.001.57 : 6 81.3

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМА ГЕЛИЯ СО СКОЛЬЗЯЩЕЙ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИЕЙ $\langle 100 \rangle$ В ОЦК РЕШЕТКЕ ЖЕЛЕЗА

А. С. Бакенов, В. В. Кирсанов, О. В. Клявин, Н. П. Лиходеев,
А. Н. Орлов

Методом моделирования на ЭВМ исследовано взаимодействие ядра скользящей краевой дислокации $\langle 100 \rangle$ в α -железе с примесью внедрения — атомом гелия в конфигурации статического краудiona $\langle 100 \rangle$. Вычислена энергия связи атома гелия с дислокацией на разных расстояниях от нее и напряжение Пайерлса. Найдены условия, когда под внешним напряжением на примесном атоме зарождаются перегибы. В остальных случаях дислокация перемещается бесперегибным механизмом как прямолинейное жесткое образование.

Взаимодействие точечных дефектов с дислокациями, определяющее многие структурно-чувствительные свойства кристаллических тел, существенно зависит не только от дальнедействующих полей упругих напряжений этих дефектов, но и от атомной структуры их ядер. Далекие взаимодействия описываются в рамках теории упругости и к настоящему времени хорошо изучены. Для теоретического исследования близких взаимодействий на атомном уровне широко используется моделирование на ЭВМ эволюции дефектных структур. Результаты (особенно абсолютные значения энергии атомных конфигураций) сильно зависят от симметрии бездефектного кристалла и от выбранного потенциала межатомного взаимодействия. Однако работы по расчету энергетических и конфигурационных параметров взаимодействия ядер дислокаций с точечными дефектами и их комплексами в настоящее время пока еще являются единичными. Поэтому систематические исследования указанных параметров, выполненные для конкретных структур и дислокаций, весьма необходимы.

В некоторых случаях ЭВМ моделирование подтверждает экстраполированные на малые расстояния результаты теории упругости. В других случаях результаты заметно различаются, и такие эффекты еще ждут своей классификации и обобщений, для проведения которых фактического материала еще недостаточно.

Данная работа проведена с целью выяснения особенностей, вносимых в характер движения дислокаций в ОЦК решетке их взаимодействием с межузельными примесными атомами гелия. Вопрос этот представляет интерес для выяснения природы дислокационной динамической диффузии [1], для радиационного материаловедения и других разделов физики твердого тела. В качестве предшественников ОЦК металлов выбрано железо как основа многих промышленных сплавов. Для железа проведено сравнительно много ЭВМ расчетов ядра краевых и винтовых дислокаций с векторами Бюргерса $\frac{1}{2}a \langle 111 \rangle$ и $a \langle 100 \rangle$ (a — постоянная решетки) в равновесном состоянии и под напряжением [2]. Обнаружено, что под касательным напряжением τ дислокация по всей своей длине, укладываемой в объем рабочей ячейки, приходит в движение при некотором значении $\tau = \tau^*$; когда энергия системы достигает максимума, система теряет устойчивость и сваливается в соседнюю длину пайерлсовского рельефа, τ^* принимается за напряжение Пайерлса τ^P . Для краевой дислокации $a \langle 100 \rangle$

$\tau^P = 0.104 \mu$ (μ — модуль сдвига) [3], для винтовой дислокации $a \langle 100 \rangle$ τ^P зависит от конфигурации ядра и от ориентации плоскости скольжения [4].

Конфигурация парной ступеньки, образованной парой собственных межузельных атомов в ядре краевой дислокации $a \langle 100 \rangle$, и механизм миграции межузельного атома в ядре такой дислокации исследованы в работах [5, 6]. Конфигурация парной полуступеньки, возникающей при захвате дислокацией $a \langle 100 \rangle$ одного межузельного атома, рассмотрена в работе [7].

В отличие от прямолинейной дислокации на краевой дислокации $a \langle 100 \rangle$ с межузельным атомом на краю экстраплоскости, образующим пару полуступенек, под действием напряжения $\tau < \tau^P$ на межузельном атоме зарождается парный перегиб [7] и перемещение дислокации происходит путем разбегания перегибов, а межузельный атом занимает соседний узел решетки, вытесняя из него атом в соседнее (по другую сторону от линии дислокации) междоузлие, расположенное на продолжении экстраполуряд атомов в его новом положении.

Вычислена также энергия внедрения атома He в бездефектную решетку [8] и в различные междоузлия вблизи винтовой дислокации $1/2a \langle 111 \rangle$ [9, 10]. Введенный заранее в ядро винтовой дислокации $1/2a \langle 111 \rangle$ перегиб перемещается в соседний минимум вторичного рельефа Пайерлса при напряжении $\tau = \tau^{2P} \ll \tau^P$. Выяснено, при каких условиях этот перегиб закрепляется атомом He [9, 10].

В продолжение этих исследований в настоящей работе рассмотрено поведение примесного атома He вблизи ядра покоящейся и скользящей краевой дислокации $a \langle 100 \rangle$. Хотя дислокация $\langle 100 \rangle$ не участвует в пластической деформации кристалла, а возникает в результате реакции двух дислокаций $1/2a \langle 111 \rangle$, она играет важную роль при зарождении микротрещин.

1. Взаимодействие атома гелия с ядром покоящейся дислокации

Модельный кристаллит, как и кристаллит B в работе [7], имел размеры (13a [100]) (11a [010]) (12a [001]) с осью дислокации [001]. Граничные условия и методика моделирования описаны в [7]. Взаимодействие атомов Fe описывалось потенциалом Джонсона [11], а атомов Fe—He—потенциалом Вильсона—Джонсона [12].

Равновесная конфигурация внедренного атома He в бездефектной решетке представляет собой статический краудин $\langle 100 \rangle$ с энергией $E_{He} = E_{He+P} - E_P = 5.26$ эВ (E_{He+P} — энергия кристаллита с атомом He; E_P — энергия участка бездефектного кристалла с таким же числом атомов). Согласно [12], $E_{He} = 5.36$ эВ.

В кристаллит с релаксированной конфигурацией атомов в ядре дислокации с энергией E_D вводился последовательно в междоузлия 1, 2, . . . , 6

Ориентация статического краудина и энергия связи атома гелия E_{D+He}^B с краевой дислокацией $a \langle 100 \rangle$ в зависимости от его положения относительно ядра дислокации

Номер положения на рис. 1	Ориентация статического краудина	E_{D+He}^B , эВ	R, нм
1	[010]	-0.34	0.45
2	[010]	-0.289	0.52
3	[001]	-0.053	0.64
4	[100]	-1.472	0.29
5	[100]	-0.411	0.72
6	[100]	-0.916	0.69

Примечание. R — расстояние от атома гелия до центра ядра дислокации.

(рис. 1) атом He в виде статического краудiona, ориентированного вдоль [001]. Повторная релаксация атомов приводила к равновесной конфигурации атома He в ядре дислокации в виде статического краудiona $\langle 100 \rangle$. Результаты расчетов даны в таблице. Энергия связи атома He с дислокацией равна $E_{D+He}^B = -(E_D + E_{He} - E_{D+He})$, где E_{D+He} — энергия кристаллита, содержащего дислокацию и атом He на большом расстоянии.

2. Взаимодействие атома гелия с движущейся дислокацией

Если к кристаллиту с дислокацией и атомом He приложить касательное напряжение τ , постепенно возрастающее вплоть до момента страгивания дислокации, происходят различные атомные перестройки. Атом He, помещенный в положения 1, 2 или 3 (рис. 1), взаимодействуя со скользящей дислокацией, переходит из межузельного положения в положение замещения. Если в начальном положении атом He занимает междоузлия 1 или 2, дислокация начинает свое движение при напряжении $\tau = 0.85\tau^P$ (скольжение дислокации происходит путем зарождения и разбега двой-

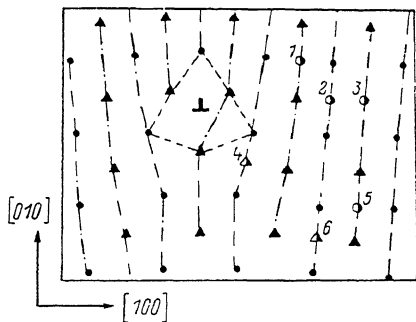


Рис. 1. Расположение атомов в плоскостях (001) ОЦК решетки вблизи ядра краевой дислокации a [001].

Треугольники — атомы в плоскости $z=0$, кружки — в плоскости $z=\pm a/2$, черно-белые значки — исходные положения межузельного атома.

ных перегибов), а если вначале атом He находится в междоузлии 3, то при $\tau = \tau^P$ (причем дислокация двигается как «жесткая палка», переходя в соседнюю долину Майерлса одновременно по всей своей длине). На рис. 2 показаны последовательные этапы взаимодействия скользящей дислокации с атомом He в исходном положении 3 (рис. 1). При $\tau = 0.77\tau^P$ атом He изменяет свое положение (рис. 2, б), а при $\tau = 0.85\tau^P$ на линии дислокации против атома He зарождается парный перегиб. Расчет показывает, что, когда перегибы разошлись на 3—4 межатомных расстояния, зарождается второй парный перегиб, одноименные перегибы сливаются и после преодоления двух пайерлсовских барьеров сегмент дислокации длиной 1—2 межатомных расстояний встречается с атомом He. Перегибы продолжают разбегаться, атом He достраивает экстраполуплоскость и образует на линии дислокации пару полуступенек противоположного знака. При неизменном напряжении $\tau = 0.85\tau^P$ дислокация с парой полуступенек продолжает движение путем зарождения на полуступеньках новой пары разноименных перегибов, которые разбегаются в противоположные стороны. При этом атом He занимает узел решетки ниже плоскости скольжения (рис. 2, в), а вытесненный атом Fe образует такую же пару полуступенек (рис. 2, г), на которой зарождается новая пара перегибов и которая далее эстафетно переносится с дислокацией. Дальнейшее движение дислокации с парой полуступенек происходит при том же напряжении $\tau = 0.85\tau^P$, как описано в [7, 13].

При помещении атома He в начальное положение 4, 5 или 6 (рис. 1) дислокация всегда скользит как «жесткая палка», при достижении напряжения Пайерлса τ^P . Атом He не влияет на процесс скольжения дислокации, но в результате прохождения дислокации мимо него он переходит из одного межузельного положения в другое, причем направление перехода противоположно направлению движения дислокации. Так, межузельный атом He 6 (рис. 1) переходит в соседнюю атомную плоскость в междоузлии типа 5, перемещаясь при этом на $a\sqrt{3}/2$.

Таким образом, мы показали, что примесный межузельный атом He, расположенный вблизи ядра краевой дислокации $a \langle 100 \rangle$ в железе, оказывает такое же воздействие на ее движение, как и собственный межузельный атом: реализуется как бесперегибный, так и перегибный механизм ее движения, обнаруженный в [7]. При этом атом He не переносится ядром дислокации, а переходит из одного междоузлия в соседнее либо из междо-

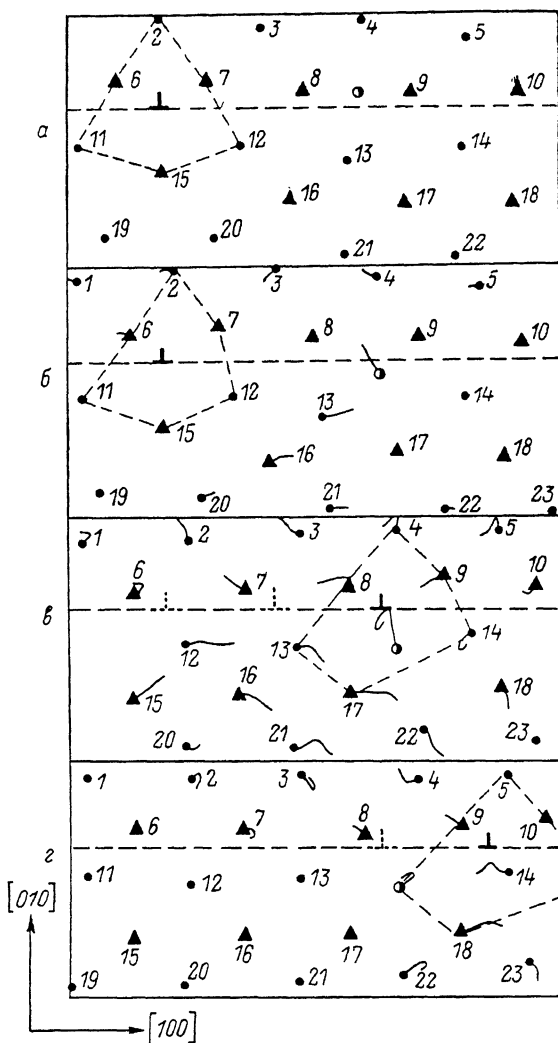


Рис. 2. Последовательные конфигурации атомов вблизи ядра дислокации $a [001]$ и атома гелия в кристалле под напряжением τ .

Значения τ/τ^P : а — 0, б — 0.77, в — 0.85 после 250 Δt , г — 0.85 после 350 Δt (Δt — временной шаг интегрирования уравнений движения атомов). Сплошными линиями показаны траектории движения атомов, а штриховыми линиями отмечено ближайшее к ядру дислокации окружение атомов. Цифрами указаны номера атомов.

узлия в узел решетки, вытесняя собственный атом в междоузлие. Этот межузельный атом на краю экстраплоскости переносится эстафетно скользящей дислокацией, на нем непрерывно зарождаются пары перегибов.

Остается проверить аналогичным, но более громоздким (из-за удлинения периода идентичности вдоль дислокации) расчетом, реализуется ли подобный механизм вытеснения атома He из междоузлия в узел решетки с последующим эстафетным переносом межузельного атома матрицы дислокацией в случае краевой дислокации $1/2 a \langle 111 \rangle$. Замена примесного атома He в ядре дислокации на собственный межузельный атом могла бы быть обнаружена методами ЯМР или ЯГР.

- [1] *Клявин О. В., Мамырин Б. А., Хабарин Л. В.* и др. ФТТ, 1976, т. 18, № 5, с. 1281—1284.
- [2] *Vitek V.* Cryst. Latt. Def., 1974, vol. 5, N 1, p. 1—34.
- [3] *Бакенов А. С., Кирсанов В. В.* ФММ, 1985, т. 59, № 4, с. 707—713.
- [4] *Бакенов А. С., Кирсанов В. В.* ФММ, 1985, т. 60, № 5, с. 1018—1020.
- [5] *Кеворкян Ю. Р., Коломытжин В. В.* ФММ, 1986, т. 62, № 4, с. 661—667.
- [6] *Kolomytchin V. V., Kevorkyan Yu. K.* Phys. St. Sol. (a), 1986, vol. 94, N 1, p. 153—160.
- [7] *Бакенов А. С., Кирсанов В. В.* ФММ, 1986, т. 62, № 2, с. 241—247.
- [8] *Beeler J. Jr.* Radiation Effects Computer Experiments. North Holland, Amsterdam, 1983.
- [9] *Клявин О. В., Лиходедов Н. П., Орлов А. Н.* ФТТ, 1985, т. 27, № 11, с. 3388—3396.
- [10] *Клявин О. В., Лиходедов Н. П., Орлов А. Н.* ФТТ, 1986, т. 28, № 1, с. 156—162.
- [11] *Johnson R. A.* Phys. Rev., 1964, vol. 134, N 5, p. 1329—1336.
- [12] *Wilson W. D., Johnson R. A.* Interatomic Potentials a. Simulation of Lattice Defects. N. Y. Plenum, 1972, p. 375—386.
- [13] *Бакенов А. С., Кирсанов В. В.* ВАНТ. Физика радиац. повреждений и радиац. материаловедение, 1986, в. 1 (38), с. 41—48.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
15 марта 1988 г.