

Компьютерное моделирование межузельных атомов в двумерных нанокристаллах

© В.А. Лагунов, А.Б. Синани

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: alfred@mdlab.ioffe.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 19 апреля 2002 г.

В окончательной редакции 15 августа 2002 г.)

Метод молекулярной динамики применен для исследования выхода межузельных атомов на свободную грань двумерного нанокристалла. Обнаружены два новых типа координации дефекта „межузельный атом“: симметричная координация „трилистника“ и линейная координация сжатых атомов. Показано, что при линейной координации в двумерной кристаллической решетке возникает дислокационный диполь. Он характеризуется высокой подвижностью, способствующей выходу межузельного атома к свободной грани кристалла. В компьютерном эксперименте исследованы случаи перехода межузельного атома от одного типа координации к другому в зависимости от температуры кристалла.

Известно, что точечные дефекты (вакансии и межузельные атомы) существенно влияют на механическое поведение кристаллов [1–2]. Однако до настоящего времени теоретические исследования ограничивались созданием правдоподобных моделей дефектов и на этой основе расчетом энергий их образования и движения в кристаллической решетке. Кроме того, сравнительно мало работ по компьютерному моделированию подобных дефектов, изменению их конфигурации во времени при различных температурах.

В данной работе межузельные атомы моделируются в кристаллах, между частицами которых действуют силы парного взаимодействия Леннарда-Джонса. Программа [3] позволяет с большой точностью вычислять потенциальную энергию кристалла, а следовательно и энергию образования межузельных атомов, являющуюся малой долей всей энергии кристалла. Она позволяет следить за изменением дефектов во времени, а разработанная в [4] методика глубокого охлаждения образцов в квазиизотермическом режиме (КИР), при котором кинетическая энергия атомов удаляется из кристалла всякий раз после достижения максимального ее значения, позволяет проводить компьютерные эксперименты для температур, близких к нулю.

Рассмотрим моделирование в двумерном кристалле одиночного точечного дефекта „межузельный атом“. Вначале внедряемый атом помещается в одно из междоузлий кристаллической решетки, затем в КИР определяется его релаксированное состояние, т.е. состояние, когда в кристалле с заданной точностью прекращается движение атомов и стабилизируются их положения. Из-за большой величины силы Леннарда-Джонса между межузельным атомом и атомами решетки в первый момент внедрения, определенной вероятности вылета атома за пределы кристаллической решетки, вычисления в соответствии с [5] проводились с уменьшенным на порядок шагом интегрирования Δt . Он принят рав-

ным $0.002 T$, где T — период собственных решеточных колебаний атомов в двумерном кристалле.

На рис. 1 показано изменение во времени минимального межатомного расстояния между внедряемым атомом и атомами матрицы кристалла в начальной фазе образования дефекта „межузельный атом“. Величина этого промежутка в релаксированном состоянии дефекта близка к 0.9 от равновесного межатомного расстояния a . Рисунок свидетельствует о быстрой релаксации моделируемого дефекта за время порядка нескольких долей T , при этом используемый метод КИР, как видно, эффективно снимает проявление волновых процессов в кристалле.

Релаксированная конфигурация полученного дефекта показана на рис. 2, а. Для наглядности здесь в момент времени $t = 4$ (время t дано в периодах собственных решеточных колебаний) приведено только окружение межузельного атома в малой окрестности кристалла.

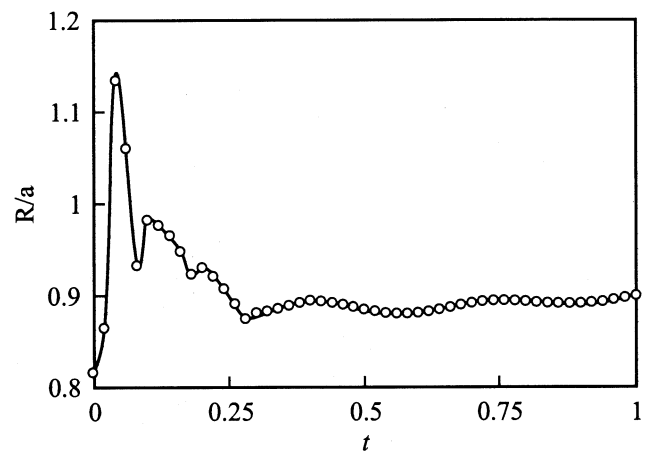


Рис. 1. Изменение во времени межатомного расстояния между атомами внедрения и матрицы при создании межузельного атома.

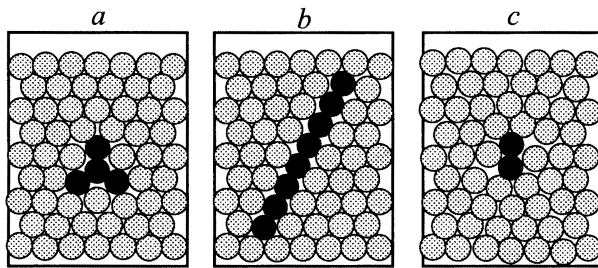


Рис. 2. Типы координации дефекта „межузельный атом“: *a* — координация „трилистника“, *b* — „линейная“ координация, *c* — координация „гантели“.

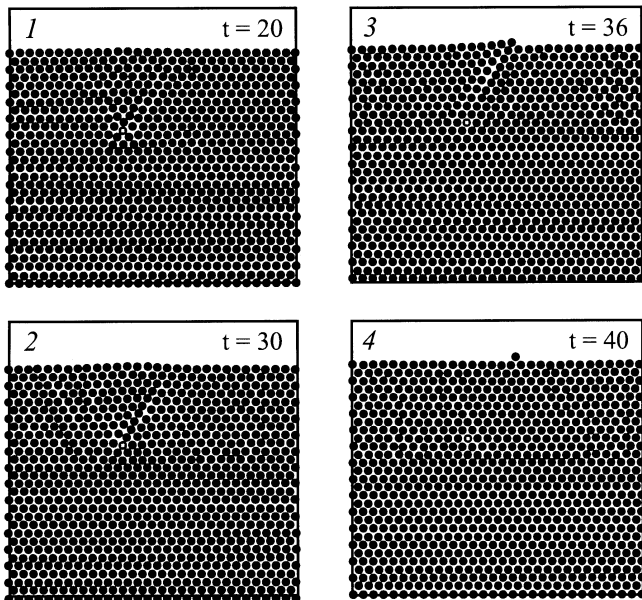


Рис. 3. Кинограмма движения дефекта „межузельный атом“ при низкой температуре.

Как видно, в плотноупакованной решетке внедренный атом вместе с тремя атомами матрицы образует звездообразный комплекс третьего порядка симметрии — „трилистник“, выделенный на рисунке более темным цветом. При этом центральный атом комплекса имеет окружение третьей координации, крайние его атомы — пятой координации, а ближайшие к нему три атома „хорошего“ кристалла имеют в своем окружении семь атомов.

Дефект такой конфигурации малоподвижен в области низких температур, что подтвердили компьютерные эксперименты при внедрении атома вблизи центральной области кристалла. Однако при заметной асимметрии расположения внедряемого атома относительно свободных краев образца, когда в окрестность зоны внедрения приходил отраженный от поверхности некомпенсированный упругий импульс достаточной величины, дефект трансформировался в другую линейную конфигурацию.

Самопроизвольно возникающий в компьютерном эксперименте линейный тип координации межузельного атома показан на рис. 2, *b*. На нем приведена конфигурация дефекта в начале его движения. В этом случае образуется кооперативная форма, когда в одном из трех пересекающихся рядов атомов двумерного кристалла возникает достаточно протяженная группа плотно упакованных атомов. На дислокационном языке такой дефект можно рассматривать как дислокационный диполь, состоящий из двух дислокаций противоположного знака, движущихся в одну сторону. Линии скольжения этих дислокаций смещены относительно друг друга на одно межатомное расстояние. Возникающая конфигурация отличается очень высокой подвижностью. Даже при низкой температуре начинается ее движение в сторону ближайшего края кристалла, что приводит в конечном итоге к быстрому „выносу“ межузельного атома на свободную границу кристалла.

Движение дефекта „межузельный атом“ к свободному краю образца при низкой температуре, когда по методике КИР вся кинетическая энергия атомов удалялась из кристалла в моменты достижения ею максимального значения, демонстрируют кадры рис. 3. На них приведены значения времени (в периодах решеточных колебаний) от начала эксперимента, внедренный атом обозначен светлой точкой. Распределение межатомных расстояний в трех соседних рядах атомов показано на рис. 4. На кривых атомам области сжатия соответствуют темные, а атомам областей разрежения — светлые точки.

Как видно из рисунка, зона сжатия включает 8–9 атомов на уровне ее полуширины, а зона разрежения значительно уже, она составляет примерно два–три межатомных промежутка. При этом в случае неподвижного дефекта наблюдается треугольная форма распределения деформации в зоне сжатия атомов. Как видно, дислокации при движении начинают расходиться. Обращает на себя внимание разная скорость распространения зон разрежения двух дислокаций, о чем свидетельствует изменение во времени расстояния между максимумами в рядах атомов зон разрежения. Скорость распространения зоны сжатия атомов близка к половине суммы скоростей разрежения.

В компьютерных экспериментах регистрировалась с высокой точностью потенциальная энергия всего кристалла; ее изменение во времени, исключая короткое время внедрения межузельного атома, показано на рис. 5. На нем зафиксировано снижение потенциальной энергии кристалла за время от $t = 20$ до 40 синхронно с выходом из кристалла межузельного атома, наблюдаемым на рис. 3, 4. По данным рис. 5, энергия образования межузельного атома в двумерном кристалле составляет 11.9 энергий диссоциации D .

Представляло интерес выяснить, как влияет температура на кинетику движения межузельного атома. Для этих опытов была приготовлена отрелаксированная за время $t = 4$ конфигурация межузельного атома, по-

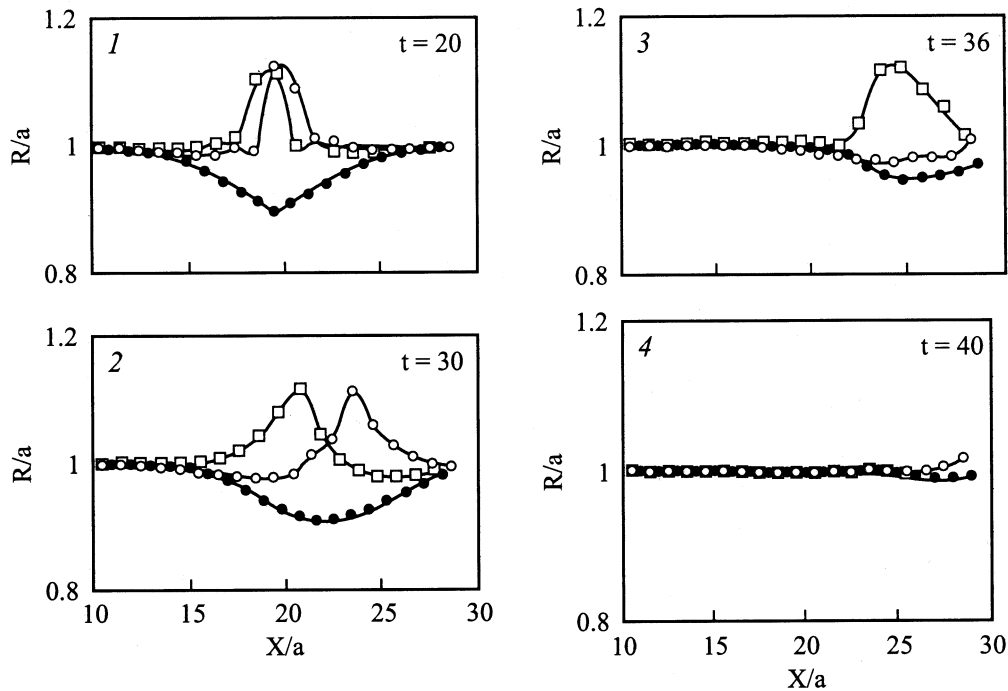


Рис. 4. Кривые распределения межатомного расстояния в трех соседних рядах атомов при низкой температуре.

лученная при таком расположении дефекта, когда он оставался неподвижным при глубоком охлаждении кристалла. Далее всему кристаллу сообщалась заданная кинетическая энергия, которая распределялась по атомам в соответствии со случайным статистическим распределением. Компьютерные опыты проводились в режиме изоляции от внешней среды, на конечном этапе включался режим глубокого охлаждения образца (КИР).

После ввода кинетической энергии в образец ее среднее значение вследствие ангармонизма сил парного взаимодействия в кристалле составляло примерно 0.47 от первоначальной кинетической энергии, а не 0.5, как в случае гармонического кристалла. На рис. 6 дана кинограмма процесса движения дефекта „межузельный атом“ к свободному краю образца при средней начальной кинетической энергии атомов (K_0) 0.1 от энергии диссоциации D . На этом рисунке показана только часть кристалла, внедренный атом обозначен крестиком.

При разогреве кристалла, помимо направленного движения дефекта в сторону ближайшего края кристалла, возникает возможность диффузионного хаотического перескока „межузельного“ атома. Такие случаи зафиксированы между кадрами 1 и 3, однако в дальнейшем наблюдался переход к линейному типу координации дефекта и его быстрый выход на боковую грань кристалла атермическим путем.

Поиск наиболее сжатого атома кристалла производился специально разработанной процедурой, которая обнаруживает местоположение межузельного атома на достаточном расстоянии от свободной грани кристалла, пока он находился между двумя дислокациями. На

рис. 7 показано изменение во времени с интервалом $\Delta t = 0.1 T$ координаты Y наиболее сжатого атома при трех различных начальных температурах кристалла.

Для выяснения причин сильного разброса кривых, особенно в случае повышенных температур испытания, на этом же рисунке даны фрагменты кривых при высоком разрешении во времени малых временных участков, на которых хорошо видны характерные особенности движения межузельного атома при трех температурах. Они показывают, что в случае нулевой начальной температуры (кривая 1) межузельный атом „скачет“ примерно один раз за время решеточного колебания и примерно 6–8 десятых периода „стоит“ на месте. При повышенных же температурах (кривые 2 и 3), как видно,

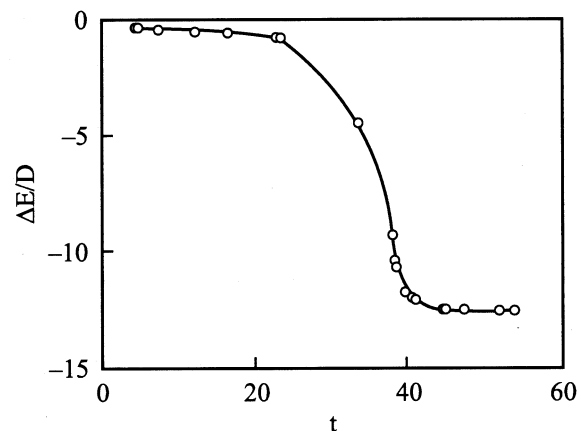


Рис. 5. Изменение потенциальной энергии нанокристалла при движении межузельного атома.

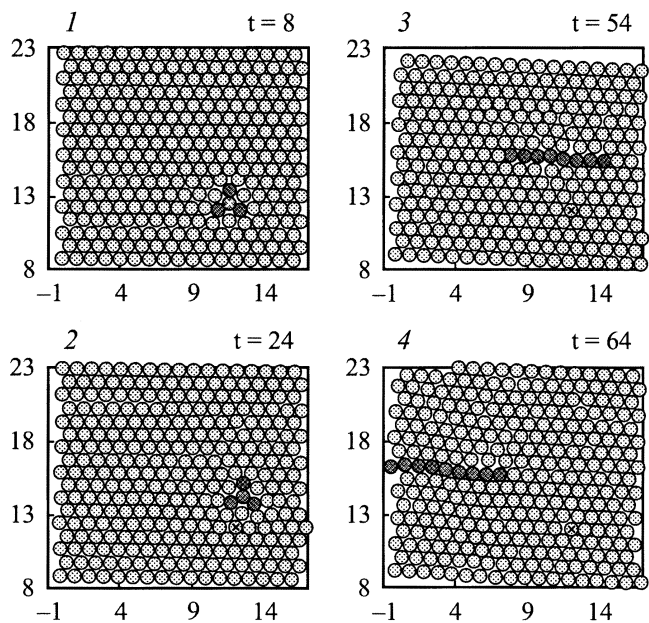


Рис. 6. Кинограмма движения дефекта „межузельный атом“ при $K_0 = 0.1 D$.

наблюдается перемещение позиции наиболее сжатого атома в группе из 4–6 атомов в двух противоположных направлениях, что является основной причиной наблюдаемого разброса.

Данные рис. 7 показывают, что при повышении температуры кристалла происходит более замедленный выход межузельного атома на свободную грань кристалла. На

последней стадии средняя скорость дефекта, согласно рис. 7 составляет $0.5-0.8 a$ за один период решеточного колебания. При этом более высокая скорость, порядка $1.0 a/T$, наблюдалась на последнем этапе „выхода“ межузельного атома при нулевой начальной температуре в неискаженном тепловым движением кристаллической решетке.

Разработанная процедура позволяет восстановить также и траекторию движения межузельного атома в кристаллической решетке путем замены параметрических зависимостей $x(t)$ и $y(t)$ явной зависимостью $y(x)$. На рис. 8 приведена подобная траектория в случае средней начальной кинетической энергии атомов кристалла, равной $0.2 D$. На нем для удобства указаны метки времени в виде светлых крестиков на темном фоне через пять периодов решеточных колебаний атомов, дающие информацию о местоположении дефекта. Рисунок показывает, что в случае теплового движения атомов перемещение межузельного атома по решетке носит характер движения „броуновской“ частицы, непредсказуемо меняющей направление и скорость своего движения. При $t \cong 16$ и 40 появляется определенная направленность в движении дефекта, которую можно связать с превращением межузельного атома в дислокационный диполь, наблюдавшийся при низкой температуре (рис. 3).

Движение дефекта „межузельный атом“ и его трансформация при смене направления движения линейной координации дефекта показана на кинограмме рис. 9 (кадры 1–3 и 4–6). Кадры получены в выбранные моменты времени в результате специальной следящей процедуры и вывешивания односвязной группы атомов

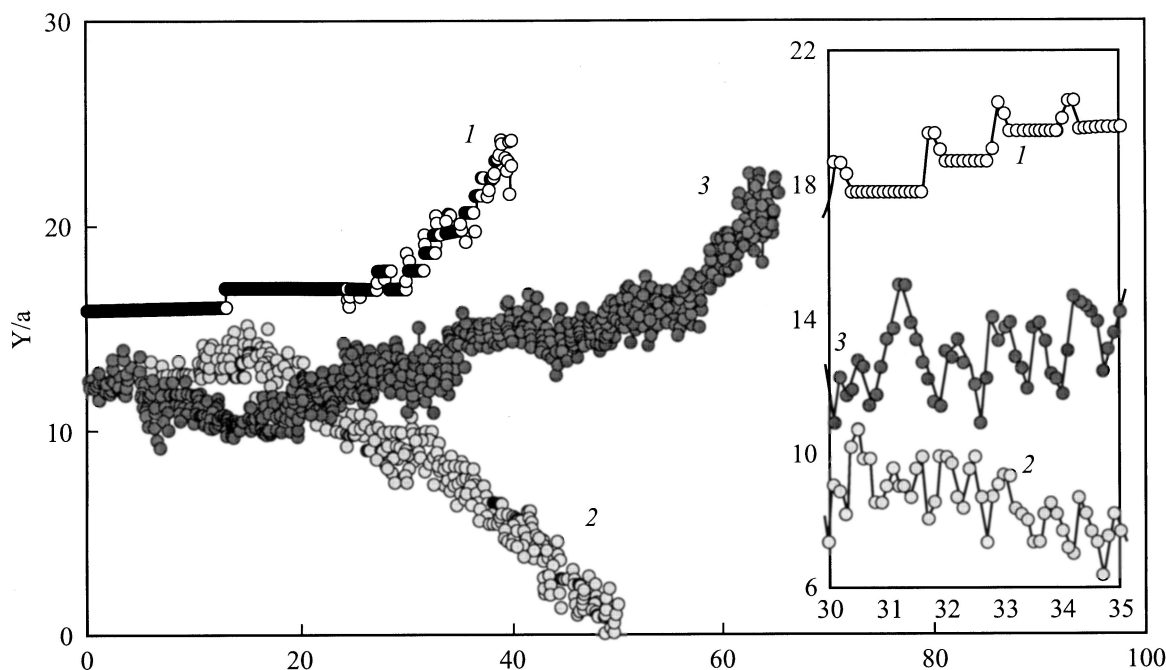


Рис. 7. Кривые изменения во времени координаты Y наиболее сжатого атома при разных температурах. 1 — $K_0 = 0$, кривая снята методом КИР, 2 — $K_0 = 0.1 D$, 3 — $K_0 = 0.2 D$.

с заданной степенью сжатия; светлыми точками помечена пара наиболее сжатых атомов, темными кружками — атомы, имеющие соседей с деформацией сжатия межатомного расстояния более половины от максимального, а крестиками — начальная позиция внедренного атома.

Анализ всех данных показал, что на участках прямолинейного движения дефекта (рис. 8) межзельный атом находится в линейной координации в сильно сжатом

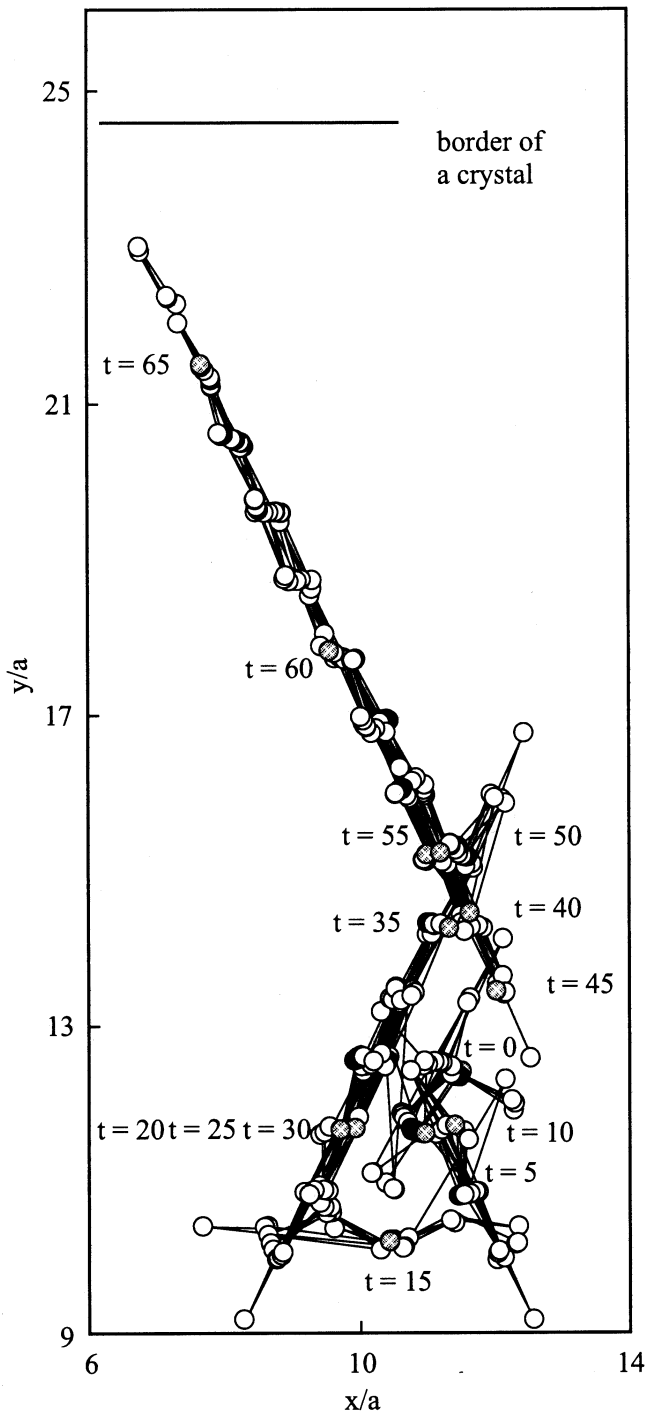


Рис. 8. Траектория движения дефекта „межузельный атом“ при $K_0 = 0.2 D$.

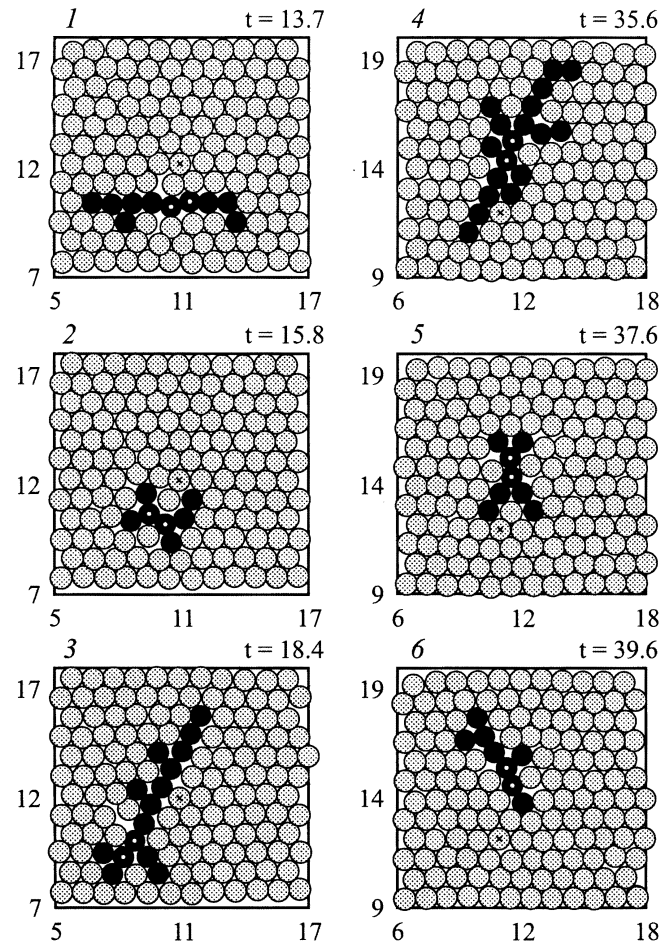


Рис. 9. Кинограмма движения дефекта „межузельный атом“ при $K_0 = 0.2 D$.

прямолинейном ряде атомов вместе с сопутствующим дислокационным диполем. Кинограмма на рис. 9 свидетельствует, во-первых, о больших размерах вызванного межзельным атомом поля искажения, которое в случае прямолинейного движения дефекта при повышенной температуре ограничивается в основном одним рядом атомов, во-вторых, о быстром (за один-два решеточных колебания) превращении линейной координации (дислокационного диполя) в точечный дефект и обратном его превращении при изменении направления движения и, в третьих, о коротком времени существовании описанной в литературе [1] еще одной точечной конфигурации межзельного атома — „гантели“ (рис. 2, с). Как видно из рис. 2, с и 9 (кадр 5), подобная конфигурация является своеобразной суперпозицией двух сильно сжатых „трилистников“ с общим лучом. Конфигурация крайне неустойчива, наблюдается менее периода решеточных колебаний в момент перехода межзельного атома из одного ряда атомов в другой.

Таким образом, „межузельный атом“ в двумерной решетке достаточно неподвижен и лишь при высокой температуре становится подобен „броуновской“ частице.

Однако его конфигурация может легко трансформироваться в дислокационный диполь, способный даже при низкой температуре обеспечить направленное движение дефекта к границе кристалла. При повышении температуры возникает вероятность прямых и обратных переходов „точечный дефект \Leftrightarrow дислокационный диполь“, приводящих к изменению направления скольжения линейных дефектов. Важно подчеркнуть, что, хотя тепловое движение увеличивает подвижность дефекта, время его выхода на свободную грань кристалла возрастает за счет „броуновской“ составляющей траектории его движения.

Список литературы

- [1] А. Дамаск, Дж. Динс. Точечные дефекты в металлах. Мир, М. (1966). 292 с.
- [2] Такамура Джин Ичи. В сб.: Физическое металловедение. Мир, М. (1968). Т. 3. С. 87.
- [3] В.А. Лагунов. ФТТ **28**, *11*, 3466 (1986).
- [4] В.А. Лагунов, А.Б. Синани. ФТТ **43**, *4*, 70 (2001).
- [5] В.А. Лагунов, А.Б. Синани. ФТТ **38**, *6*, 1791 (1996).