

ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ПОДВИЖНОСТЬ ВЕРШИННЫХ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ НА ГРАНИЦЕ БИМЕТАЛЛА Pt-Al

Захаров П.В.

Руководитель – профессор, д. ф.-м. н. Старостенков М.Д.

Алтайская государственная академия образования
имени В.М. Шукшина, г. Бийск,
zakharovpvl@rambler.ru

Значительную роль в прочности кристаллов играет наличие дислокаций в их структуре. В частности дислокации оказывают существенное влияние на величину напряжения, необходимого для пластической деформации кристалла [1].

Подвижность дислокаций чаще всего обусловлена наличием внешних напряжений приложенных к кристаллу, так как сама дислокация обладает собственным полем напряжения. Кроме того точечные дефекты и их агрегаты могут служить причиной движения дислокации [1, 2].

В данной работе методом молекулярной динамики посредством компьютерного моделирования рассматривается механизм термоактивации движения дислокаций несоответствия (ДН) на границе биметаллов при наличии точечных дефектов. Рассматривалась граница биметалла Pt-Al.

Исследуемая модель границы биметаллов имеет ряд особенностей. Во-первых, рассматривается двумерная модель плоскости $\{111\}$ ГЦК решетки. Двумерные модели кристаллических решеток при всех их недостатках, тем не менее, в большинстве случаев дают правильные ориентиры в поисках тех или иных эффектов. Число частиц в расчетной ячейке составляет 3200. Во-вторых, накладываемые граничные условия на ячейку: вдоль оси X (направление $\langle 110 \rangle$) накладывались периодические условия, вдоль ось Y (направление $\langle 112 \rangle$) – свободные, направление осей указано на рис. 1.1. В-третьих, атомы расчетной ячейки взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе. Граница металлов проходила через середину ячейки. Заданные условия моделировались посредством компьютерной программы [4].

Из-за разницы постоянных решеток при формировании границы биметалла Pt-Al образуются вершинные дислокации несоответствия [5, 6], представленные на рис. 1. Если температура расчетной ячейки превышает 40 К, то за счет термических флуктуаций атомов ДН могут перемещаться вдоль границы биметалла, без внешних напряжений. О возможности движения дислокаций при сверхнизких температурах так же говорится в работе [3].

Подобного рода смещения ДН заметны, если сравнить рис. 1.1. и рис. 1.2. Они происходят в произвольном направлении. Особенностью таких смещений является то, что смещение одной ДН приводит к смещению

соседних ДН, объяснить коллективные смещения дислокаций можно тем, что они одного знака. Кроме того, движение дислокаций по всей ячейки вызвано наложением периодических условий.

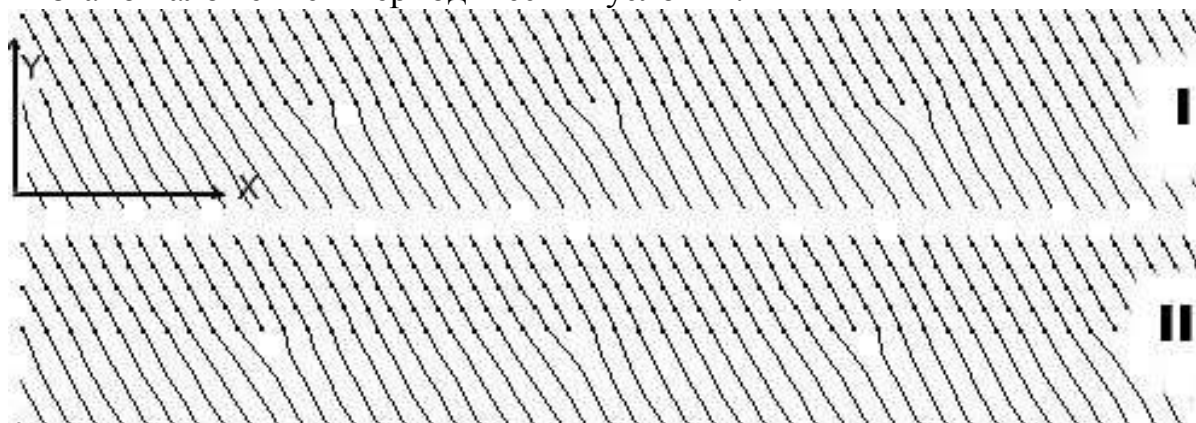


Рис. 1. Граница биметалла Pt-Al: I – в начальный момент, $T=100$ К, II – через 5 пс., $T=100$ К.

Рассмотрим влияние точечных дефектов на границе металлов на вышеуказанный процесс. В качестве дефектов используются атомы замещения и вакансии.

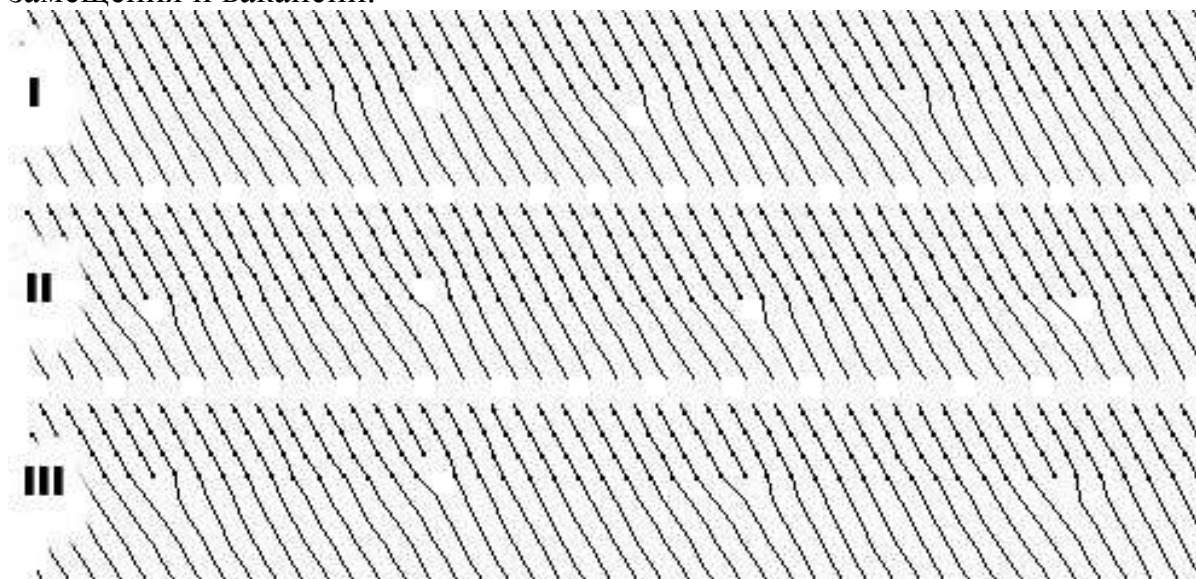


Рис. 2. Подвижность дислокаций несоответствия на границе биметалла Pt-Al при наличии вакансии, $T=100$ К: I – начальная конфигурация, II – через 5 пс, III – через 50 пс.

Внедренная вакансия и расположение ДН представлена на рис. 3 I. В результате релаксации расчетной ячейки происходит движение ближайшей ДН в стону вакансии, результат представлен на рис. 2. II. Такая конфигурация оказалась устойчивой, т.е. с течением времени смещения дислокации не происходит, что может подтвердить сравнение рис. 2. II и III, в результате другие ДН так же не испытывают значительных смещений относительно первоначального положения. Это объясняется значительным увеличением энергетического барьера при введении дефекта в структуру ячейки, т.к. при поглощении дислокацией вакансии происходит ее

переползание на одно межатомное расстояние вглубь решетки Pt. Для его преодоления мы используем повышение температуры ячейки. Такой механизм не требует накладывания на систему дополнительных механических напряжений, а осуществляется посредством термических флуктуаций атомов решетки.

В биметалле Pt-Al для преодоления возникшего барьера при наличии одной вакансии достаточно было нагреть расчетную ячейку до температуры равной 560 К, т.е. выше такой температуры возможно перемещение дислокации вдоль границы биметалла.

При замещении атома Pt атомом Al наблюдается схожее поведение ДН. Первоначально происходит движение ДН к атому замещения, после чего атом замещения занимает место в дислокации, при этом не происходит неконсервативного движения дислокации, как в случае с вакансией, – нет переползания дислокации. Такое расположение атомов является менее устойчивым по сравнению с первоначальной конфигурацией. При этом устойчивость к повышению температуры ячейки составляет 200 К, при меньшей температуре не происходит смещения ДН вдоль границы биметалла. Это свидетельствует о меньшем потенциальном барьере при наличии атома замещения, чем при наличии вакансии.

Подводя итог, можно сказать, что наличие небольшого числа точечных дефектов (вакансий или атомов замещения) может оказывать запирающий эффект для движения дислокаций несоответствия на границе биметалла Pt-Al. Так же проведенные компьютерные эксперименты подтверждают роль дислокаций, как стока для точечных дефектов. Кроме того, подчеркивается роль единичных точечных дефектов в динамике кристаллической решетки.

Список литературы.

1. Физическое материаловедение: учебник для вузов./ под общей ред. Б.А. Калина. – М.: Мифи, 2007. ISBN 978-5-7262-0821-3
2. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела: Учеб. – 3-е изд. Стер. – М.: Высш. шк.; 2000. – 494 с. Ил. ISBN 5-06-003770-3.
3. Низкотемпературное движение дислокаций как возможный механизм образования одномерных электронных структур в полупроводниковых кристаллах. – Письма в ЖЭТФ, том 66, вып 10, с-639-644.
4. Полетаев, Г.М. Моделирование методом молекулярной динамики структурно-энергетических превращений в двумерных металлах и сплавах (MD2). Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2008610486 от 25.01.2008.
5. Попова Г.В. Стабильность межфазных границ композиционных материалов системы Ni-Al: Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. – Барнаул, 2006. – 22 с.