

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОСКИХ ДЕФЕКТОВ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ ГПУ РЕШЕТКИ

Е. В. Черных, М. А. Баранов, М. Д. Старостенков

*Алтайский государственный технический университет,  
г. Барнаул, пр. Ленина, 46, 656099, Россия,  
e-mail: asba@ab.ru*

Выполнено исследование энергетических и структурных свойств плоских дефектов в металлах и упорядоченных сплавах с ГПУ решеткой. Учет анизотропного характера межатомных взаимодействий в ГПУ сплавах проведен путем введения специального парного межатомного потенциала. Параметры потенциалов для Mg, Cd, Ti, Co определены, исходя из экспериментально известных свойств этих металлов. Расчеты равновесных конфигураций и энергии образования выполнены для плоских дефектов в чистых металлах и сплавах  $Mg_3Cd$  и  $Ti_3Al$  со сверхструктурой  $D0_{19}$ .

### Введение

Металлы и сплавы с ГПУ решеткой широко применяются в военной, космической, авиационной технике вследствие их высокой коррозионной стойкости, прочности, жаропрочности в сочетании с низкой плотностью. Прочностные свойства ГПУ сплавов могут быть улучшены путем образования в них упорядоченных фаз и связанных с ними специфических дефектов. Составной частью современных поисков оптимального набора физико-механических свойств сплава являются методы компьютерного моделирования, которые позволяют описать свойства дефектов кристаллической решетки на атомном уровне. Большое влияние на свойства сплавов оказывают плоские дефекты вследствие их значительной протяженности. В настоящей работе предпринята попытка описания микродеформаций вблизи плоских дефектов в металлах и упорядоченных сплавах с ГПУ решеткой. Подробные исследования свойств плоских дефектов в упорядоченных сплавах на основе ГЦК и ОЦК решеток выполнены в [1-4] с применением сферически симметричных межатомных потенциалов типа Морза и Леннарда-Джонса. Между тем, детальных компьютерных исследований ГПУ сплавов почти не проводилось [5,6,7]. Одной из причин этого является наличие явно выраженной анизотропии ГПУ решетки. В этой связи применение сферически симметричных межатомных потенциалов к ГПУ металлам не позволяет адекватно описать их наблюдаемые физические характеристики и, в частности, пропорции между энергиями образования различных дефектов.

### Описание модели

Решение проблемы моделирования дефектов в ГПУ металлах и сплавах возможно путем учета многочастичных межатомных связей. Однако использование подобного подхода связано с неоправданными трудностями как вычислительного, так и принципиального характера. Альтернативным путем является построение анизотропных парных межатомных потенциалов, которые, по-видимому, реализуются в ГПУ решетке.

Подобный потенциал должен зависеть не только от длины межатомных связей, но и от ее ориентации по отношению к главной оси кристалла.

Наиболее просто потенциальную функцию представить в виде двух сомножителей, один из которых зависит от ориентации межатомной связи, а другой от ее длины. Нами выбирался следующий вид межатомного потенциала

$$\varphi(r, \theta) = (1 + \zeta \cos^2 \theta) \varphi_M(r), \quad (1)$$

$$\text{где } \varphi_M(r) = D \beta e^{-\alpha r} (\beta e^{-\alpha r} - 2) - \quad (2)$$

потенциальная функция Морза;  $\theta$  – угол между вектором межатомной связи и плоскостью (001);  $r$  – расстояние между атомами металла, расположенными в узлах решетки. Внутренняя энергия металла в расчете на атом традиционно представляется в виде суммы по решетке

$$U = \frac{1}{2} \sum_j \varphi(r_j, \theta_j). \quad (3)$$

Для определения параметров  $D$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\zeta$  потенциала (1) необходимо привлечь надежно определяемые характеристики кристалла. Применение для этих целей энергии сублимации оказывается, вообще говоря, не совсем корректным. Действительно, по своему смыслу межатомный потенциал должен описывать взаимодействие атомов внутри кристалла, но не их отрыв, поскольку при этом происходит изменение конфигураций электронных оболочек сублимируемого атома, что требует дополнительной энергии, не учитываемой в межатомном потенциале. При образовании вакансии все атомы остаются в пределах кристалла. При этом происходит разрыв половины связей одного из атомов с остальными. С учетом (3) можно записать

$$U(a_0, \eta) = -E_{v_0}^f, \quad (4)$$

где  $a_0$  – параметр ГПУ ячейки;  $\eta = c_0/a_0$  – соотношение основных параметров ячейки;  $E_{v_0}^f$  – энергия образования вакансии в гипотетической стартовой конфигурации, когда атомы, окружающие вакансию, остаются в тех же положениях, что и в идеальном кристалле. Экспериментально значение  $E_{v_0}^f$  не может быть определено и подбирается методом последовательных приближений в процессе определения параметров потенциала так, чтобы значение энергии образования вакансии в равновесной конфигурации  $E_v^f$  совпало с экспериментальным.

Другие три уравнения выражают собой условия устойчивости решетки при экспериментальных размерах элементарной ячейки  $a_0$ ,  $c_0$

$$\left. \begin{aligned} \frac{dU}{da_0} &= 0, \\ \frac{dU}{d\eta} &= 0, \\ V_0 \frac{d^2U}{dV_0^2} &= B, \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

где  $V_0 = \frac{\sqrt{3}}{4} \eta a_0^3$  – атомный объем;  $B$  – модуль всестороннего сжатия. Подстановка (3), (1), (2) в уравнения (4) и (5) приводит к системе для определения  $\zeta$ ,  $D$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ :

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_k z_k \varphi(r_k) &= -E_{v_0}^f, \\ \sum_k z_k \left( \frac{\partial \varphi}{\partial r_k} \right) \left( \frac{dr_k}{da_0} \right) &= 0, \\ \sum_k z_k \left[ \zeta \frac{\partial \cos^2 \theta_k}{\partial \eta} \varphi_M(r_k) + (1 + \zeta \cos^2 \theta_k) \frac{\partial \varphi_M(r_k)}{\partial r_k} \left( \frac{dr_k}{d\eta} \right) \right] &= 0, \\ \frac{4\sqrt{3}}{27 \eta a_0} \sum_k z_k \frac{d^2 \varphi}{dr_k^2} \left( \frac{dr_k}{da_0} \right)^2 &= B. \end{aligned} \right\} (6)$$

Численные решения системы (6) для ряда ГПУ металлов приведены в таблице 1. Потенциалы, связывающие атомы одинакового сорта в сплаве, полагались теми же самыми, что и в металле. Параметры потенциалов, описывающих взаимодействия между разными атомами, подбирались из условий соответствия рассчитанных равновесных экспериментальных значений энергий образования плоских дефектов известным экспериментальным значениям. Параметры межатомных потенциалов, описывающих взаимодействие атомов в упорядоченных сплавах  $Mg_3Cd$  и  $Ti_3Al$  приведены в таблице 2, а их вид – на рис. 1.

Т а б л и ц а 1. Исходные данные и параметры межатомных потенциалов в некоторых ГПУ металлах

металл	$a_0, \text{Å}$	$\eta$	$E_{v_0}^f$	$E_v^f$	$B, \text{эВ/Å}^3$	$\zeta$	$\alpha, 1/\text{Å}$	$\beta$	$D, \text{эВ}$
Mg	3.21	1.6231	2.8	1.6	0.221	-0.043	0.854	27.91	0.0682
Cd	2.98	1.886	2.0	1.2	0.292	-0.692	1.245	72.70	0.1186
Ti	2.95	1.586	2.5	1.6	1.051	0.831	1.224	46.72	0.0610
Co	2.51	1.622	3.6	2.0	1.195	0.4045	1.365	40.56	0.1757

Т а б л и ц а 2. Параметры межатомных потенциалов в сплавах  $Mg_3Cd$  и  $Ti_3Al$  со сверхструктурой  $D0_{19}$

сплав	тип взаимодействия	$\zeta$	$\alpha, 1/\text{Å}$	$\beta$	$D, \text{эВ}$
$Mg_3Cd$	Mg-Mg	-0.043	0.854	27.91	0.0682
	Mg-Cd	-0.84	1.166	46.99	0.38
	Cd-Cd	-0.692	1.245	72.70	0.1186
$Ti_3Al$	Ti-Ti	0.831	1.224	46.72	0.0610
	Ti-Al	0.641	1.2345	48.99	0.1799
	Al-Al	0	1.02448	27.1817	0.3169

При моделировании плоского дефекта кристалл представлялся состоящим из набора плоскостей параллельных дефекту. Поиск равновесной конфигурации дефекта осуществляли путем наложения жестких граничных условий на края блока и представления «свободного» перемещения атомов средней части блока. В результате релаксации в памяти кристалла формировался «образец» кристалла с плоским дефектом, который затем проектировался на плоскость рисунка. Микродеформации кристаллической решетки представлялись в виде векторов атомных смещений в увеличенном масштабе.

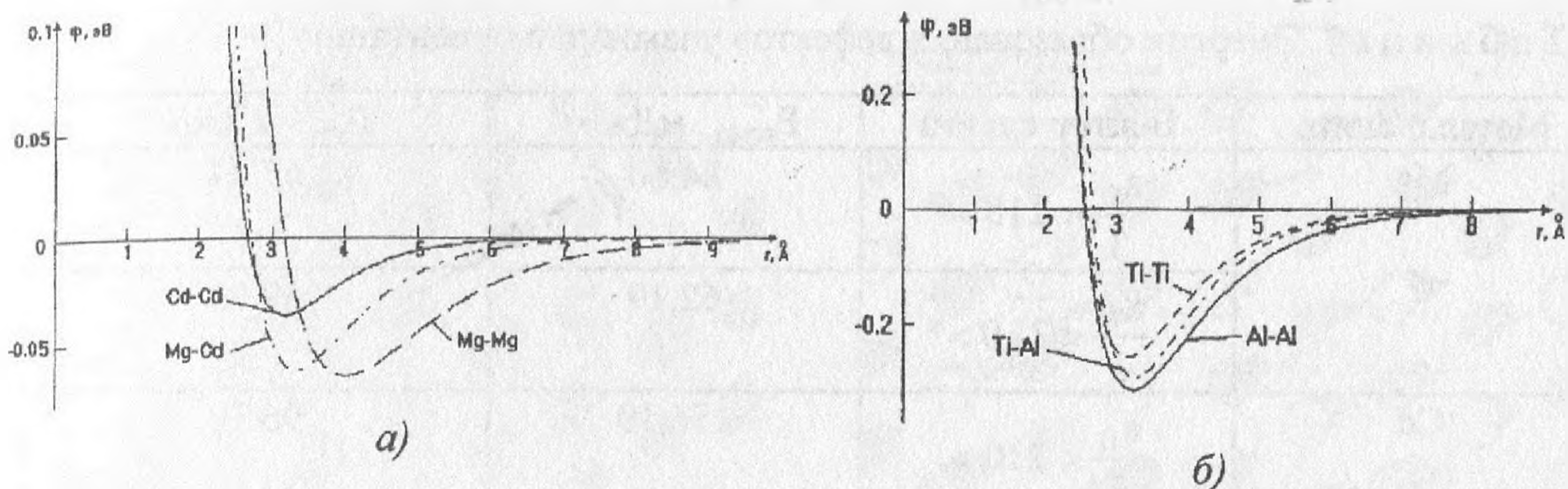


Рис. 1. Межатомные потенциалы, описывающие взаимодействие атомов в сплаве  $Mg_3Cd$  (а), расположенных на одной плоскости (001) ( $\theta = 0$ ); и сплаве  $Ti_3Al$  (б).

### Результаты и их обсуждение.

В работе рассчитаны дефекты упаковки (ДУ) в плоскости {001}, образованные различными векторами сдвига. Энергии образования ДУ для металлов и сплавов с ГПУ решеткой (таблица 3) хорошо согласуются с экспериментальными значениями [8]. Данный дефект моделировался в металлах: Ti, Cd, Mg и Co. Картины атомных конфигураций вблизи ДУ в плоскости (001) в магнии показаны на рис. 2.

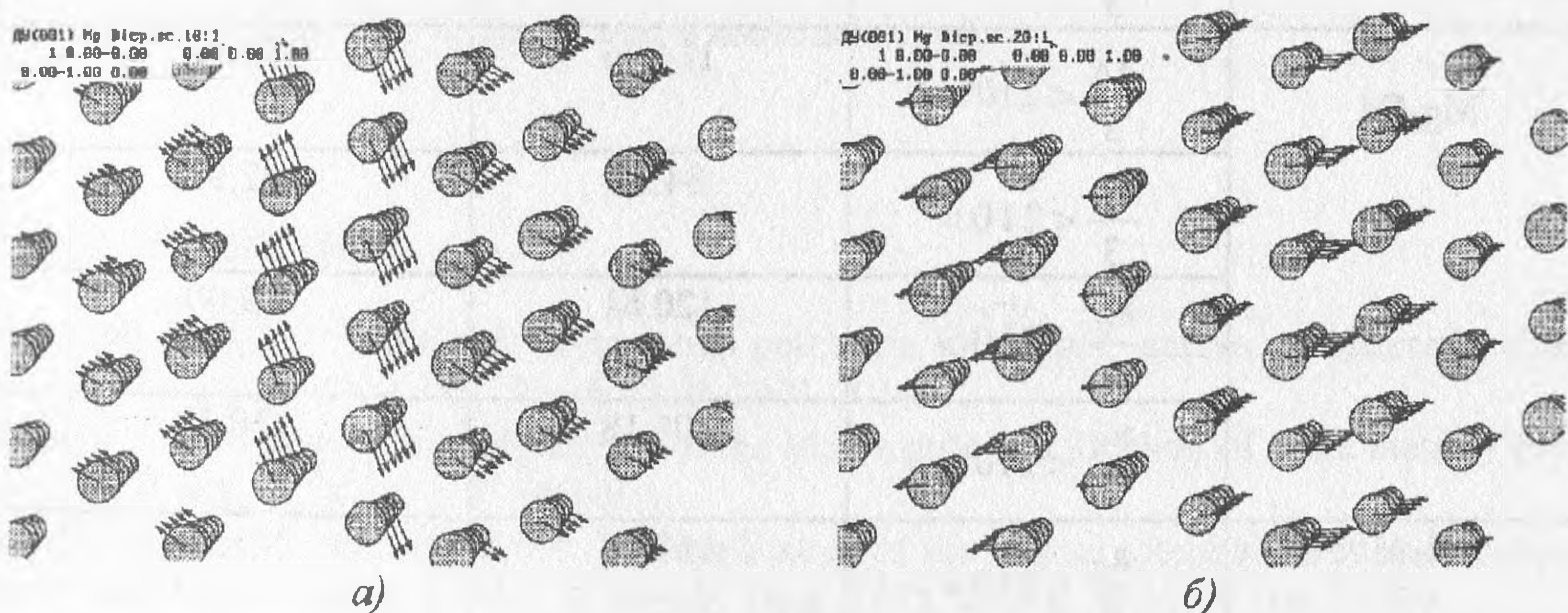


Рис. 2. Атомные конфигурации и микродеформация решетки Mg вблизи дефектов упаковки, полученных сдвигом на вектор  $\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$  (а); и  $\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}\bar{1}0 \rangle$  (б). Масштаб атомных смещений: 10:1 (а); 20:1 (б).

Как видно из рисунка при сдвиге атомов в направлении  $\langle \bar{2}10 \rangle$  наблюдаются как нормальные, так и сдвиговые смещения атомов Mg. Величины смещений максимальны в первых плоскостях и постепенно затухают к четвертым-пятым плоскостям. При сдвиге полукристалла в направлении  $\langle \bar{2}10 \rangle$  векторы атомных смещений оказываются перпендикулярными к поверхности дефекта и достигают максимума на вторых-третьих плоскостях от ДУ. При образовании ДУ путем сдвига на вектор в направлении  $\langle \bar{2}10 \rangle$  величины смещений в 4 раза больше, чем при векторе сдвига в направлении  $\langle \bar{2}\bar{1}0 \rangle$ . Характерно, что в обоих рассмотренных случаях прослеживается центральная симметрия ДУ.

Т а б л и ц а 3. Энергии образования дефектов упаковки в ориентации {001}

Металл, сплав	Вектор сдвига	$E_{\text{старт.}}$ , мДж/м <sup>2</sup>	$E_{\text{рав.}}$ , мДж/м <sup>2</sup>
Mg	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	84.60	67.44
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}\bar{1}0 \rangle$	62.19	59.93
Cd	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	156.19	96.30
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}\bar{1}0 \rangle$	87.28	84.13
Ti	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	51.24	36.62
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}\bar{1}0 \rangle$	25.77	24.98
Co	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	185.52	138.09
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}\bar{1}0 \rangle$	102.34	98.64
Mg <sub>3</sub> Cd	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	114.76	56.18
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}\bar{1}0 \rangle$	84.22	82.95
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	120.61	99.00
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	308.18	170.32
Ti <sub>3</sub> Al	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	169.96	162.63
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}\bar{1}0 \rangle$	252.32	110.31
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	508.58	173.33
	$\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$	229.19	176.14

На рис. 3 показаны смещения атомов разного сорта в сплаве Mg<sub>3</sub>Cd со сверхструктурой D0<sub>19</sub>. Следует заметить, что при сдвиге атомов на вектор  $\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$  преобладают сдвиговые смещения атомов. Смещения максимальны в первых-вторых плоскостях, затем плавно затухают к четвертым-пятым плоскостям. То же самое характерно и для смещений атомов в направлении  $\langle 210 \rangle$ . Здесь присутствуют смещения, направленные по нормали к плоскости дефекта и сдвиговые смещения. В целом, полученные картины атомных конфигураций также являются симметричными.

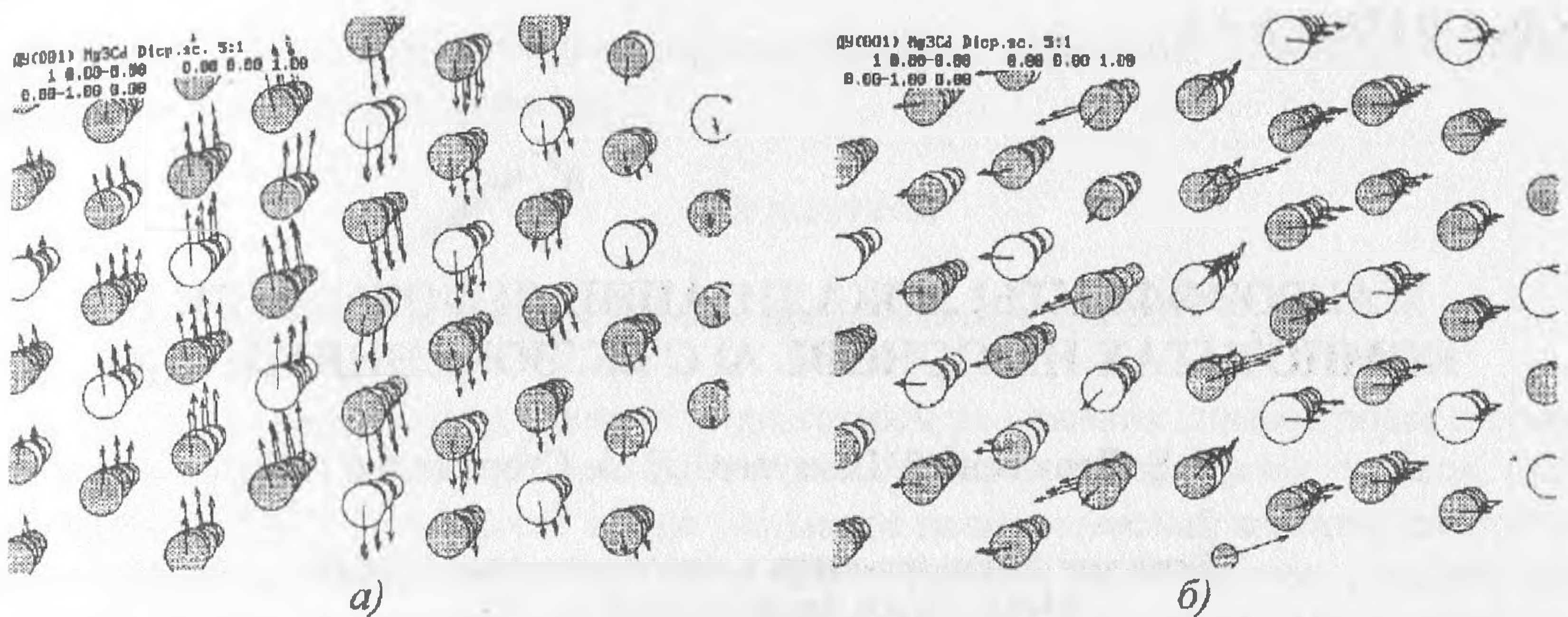


Рис. 3. Атомные конфигурации и микродеформация решетки  $Mg_3Cd$  вблизи дефектов упаковки, полученных сдвигом на вектор  $\frac{a_0}{3} \langle \bar{2}10 \rangle$  (а); и  $\frac{a_0}{3} \langle 210 \rangle$  (б). Белые кружки – атомы Cd, черные кружки – атомы Mg. Ориентация: (001) – плоскость рисунка,  $\langle 001 \rangle$  – вправо. Масштаб атомных смещений 5:1 (а, б).

Приемлемые значения энергий образования плоских дефектов и наблюдаемые атомные конфигурации показывают, что в кристаллах с ГПУ - решеткой проявляется анизотропный характер межатомных взаимодействий.

### Список литературы

1. Maeda K., Vitek V., Sutton S. Interatomic potentials for atomic studies of defects in binary alloys// Acta. Met. 1982. Vol. 30, № 12. P. 2001-2010.
2. Girifalco L.A., Weizer V.G. Application of the Morse potential function of cubic metals// Phys. Rev. 1959. Vol. 1114, № 3. P. 687-694.
3. Roy D., Manna A., Sen Gupta S.P. The application of the Morse potential function in ordered  $Cu_3Al$  and  $Au_3Cu$  alloys// J. Phys. F. Metall. Phys. 1972. Vol. 2, № 11. P. 1092-1099.
4. Machlin E.S. Pair potential model of intermetallic phases// Acta. Metall. 1974. Vol. 22, P. 9-121.
5. Abe T., Onodera H. Prediction of atomic configurations in alloys// Computational Materials Science. 1999. 14. P. 311-317.
6. В.В. Кирсанов, А.Н. Орлов. Моделирование на ЭВМ атомных конфигураций дефектов в металлах// Успехи физических наук. 1984. том 141, вып. 2.
7. Erkos S. A new empirical many-body potential energy function (II)// Phys. Stat. Sol. (b). 1989. Vol. 155. P. 461.
8. Н.И. Носкова. Дефекты и деформация монокристаллов. Екатеринбург, УрО РАН, 1995. ISBN 5-7691-0528-3.