

## МЕХАНИЗМЫ ДИФФУЗИИ В ДВУМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Старостенков М. Д.<sup>1)</sup>, Полетяев Г. М.<sup>1)</sup>, Демьян И. А.<sup>2)</sup>, Пацева Ю. В.<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> Алтайский государственный технический университет, Барнаул, Россия,  
[genphys@agtu.secna.ru](mailto:genphys@agtu.secna.ru)

<sup>2)</sup> Восточно-Казахстанский государственный университет,  
 Усть-Каменогорск, Казахстан,  
[daltck@uke.kz](mailto:daltck@uke.kz)

Методом молекулярной динамики исследуются механизмы термоактивируемой диффузии в двумерных нанокристаллах чистых металлов Ni и Al. Взаимодействия между атомами задавались парными межатомными потенциалами Морза с учетом межатомных связей до 8<sup>ми</sup> координационной сферы. Расчетный блок кристалла представляется упаковкой атомов, соответствующей плоскости [111] ГЦК решетки. За пределами блока кристалл повторялся на бесконечность с помощью периодических граничных условий. Идеально упакованный блок кристалла импульсно разогревался до определенной температуры, затем выдерживался при этой температуре в течение 100 компьютерного времени, затем быстро охлаждался. Компьютерный эксперимент показал, что первыми начинают работать кольцевой и краудионный механизмы диффузии при температуре  $0,9T_{пл}$  ( $T_{пл}$  – температура плавления). Коэффициент диффузии возрастает, массоперенос на атомном уровне наблюдается, но идеальная структура нанокристалла не нарушается. При приближении к температуре плавления добавляется новый механизм диффузии, представляющий собой пару Френкеля вакансия - межузельный атом. С этих температур его роль в структурно-энергетической перестройке двумерного нанокристалла оказывается основной. Примеры действия механизмов приводятся на рис. 1 и 2.

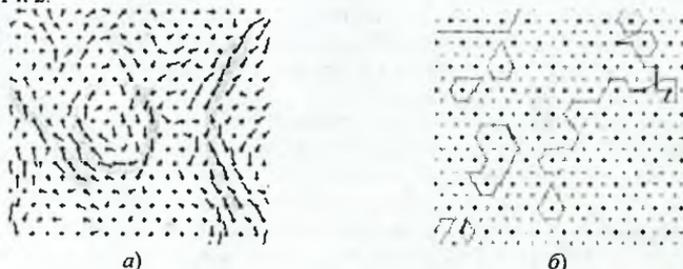


Рис. 1. Механизмы диффузии: а) краудионный при  $T = 1150$  К; б) кольцевой при  $T = 1200$  К.

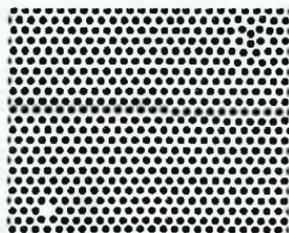


Рис. 2. Механизм, представляющий собой пару Френкеля вакансия – межузельный атом при  $T = 1400$  К.