

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ імені Г.В. Курдюмова

ФІЛАТОВ Олександр Валентинович

УДК 539.219.3:53

**МІГРАЦІЯ АТОМІВ ПРИ УДАРНІЙ ДЕФОРМАЦІЇ
ІДЕАЛЬНИХ МЕТАЛЕВИХ КРИСТАЛІВ**

Спеціальність 01.04.13 – фізика металів

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук

Київ – 2005

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті металофізики ім. Г.В. Курдюмова Національної академії наук України.

Науковий консультант: доктор технічних наук, старший науковий співробітник,

Мазанко Володимир Федорович,
Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова
НАН України, завідувач відділу

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник,

Подрезов Юрій Миколайович,
Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М.
Францевича НАН України, завідувач відділу

доктор фізико-математичних наук, професор,
Гусак Андрій Михайлович,
Черкаський національний університет ім.
Богдана Хмельницького, професор кафедри
теоретичної фізики

доктор фізико-математичних наук, доцент,
Волошко Світлана Михайловна,
Національний технічний університет України
“Київський політехнічний інститут”, професор
кафедри фізики металів

Провідна установа: Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, кафедра фізики металів

Захист відбудеться "___" квітня 2005 р. о ___ годині на засіданні Спеціалізованої вченої ради Д 26.168.01 Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України за адресою: 03142, м. Київ, бульв. Акад. Вернадського, 36.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України за адресою: 03142, м. Київ, бульв. Акад. Вернадського, 36.

Автореферат розісланий "___" березня 2005 р.

Вчений секретар

Спеціалізованої вченої ради Д 26.168.01

Доктор фізико-математичних наук

В.К. Піщак

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Дифузія й інші процеси масопереносу відбуваються у фізичних системах у найрізноманітніших умовах. Перенос маси бере участь у формуванні структури і фазового складу, що визначають комплекс фізико-хімічних, механічних і інших властивостей твердих тіл і впливає на їхню стабільність. Процеси дифузії у твердих тілах досліджуються досить широко. Однак явище аномального збільшення рухливості атомів у металах, викликане імпульсними впливами, є недостатньо дослідженою проблемою, особливо це стосується процесів, що лежать у фундаменті цього явища. Це викликано тим, що масоперенос в істотно нерівноважних умовах являє собою результат одночасної дії декількох процесів, що включає зміну структурного стану кристала, утворення дефектів структури і їхню міграцію, виникнення і релаксацію напружень і інших. Часто паралельно з масопереносом протікає пластична деформація. Поки не ясно, яким чином деформація впливає на рухливість атомів. Тому для з'ясування механізму масопереносу необхідно попередньо вивчити, якими процесами на атомному рівні супроводжується деформація в металах. Корені цих явищ ідуть на атомний рівень, який, як і раніше, під час імпульсного впливу майже недоступний для експериментаторів. У більшості експериментів по дослідженню масопереносу доступна лише інформація про стан зразків до і після імпульсних впливів. Порівняння результатів експериментів в умовах різних впливів (ударна хвиля, механічний удар і ін.) дає можливість виявити загальні, найбільш суттєві закономірності масопереносу.

Складність процесів, що відбуваються на атомному рівні при імпульсних впливах, не дає можливість одержати їхній строгий аналітичний опис. Розвиток комп'ютерної техніки протягом останніх десятиліть дає можливість використовувати її для вивчення таких процесів за допомогою моделювання методом молекулярної динаміки.

У той же час атомний рівень є тим елементарним рівнем, з якого починаються процеси деформування твердого тіла. Тому вивчення рухливості атомів також дає можливість виявлення закономірностей ініціювання деформації металів, що має фундаментальне значення.

Поведінка і реакція матеріалів на динамічні впливи (вибухова обробка ударними хвилями, механічний удар, ультразвукова обробка, лазерне опромінення, іонна обробка) крім параметрів впливу, у кінцевому рахунку, визначаються рухливістю атомів, що визначає

актуальність обраної теми. Вивчення цих процесів також актуально для детального аналізу основ мікроскопічної теорії дифузії.

Зв'язок з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконувалася в рамках бюджетних тим відділу фізики нестационарного масопереносу Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України (м. Київ) "Вивчення масопереносу в металах у різних умовах імпульсних впливів при низьких температурах" № держреєстрації 01890011938 (1993 - 1996), "Дослідження фазоутворення при нестационарному масопереносі в подвійних металевих системах" № держреєстрації 0197U009241 (1997 - 2000), "Масоперенос у металевих системах із проміжним шаром і його взаємозв'язок зі структурно-фазовим станом" № держреєстрації 0101U002253 (2001 - 2003), "Вплив зовнішніх фізичних полів на характеристики масопереносу в умовах імпульсної деформації" № держреєстрації 0104U000078 (2004), проекту Держкомітету з питань науки і технологій "Використання імпульсних технологій для надання нових властивостей поверхні конструкційних матеріалів для авіаційної і космічної техніки" №7.2.2/028 (1992 - 1993), проекту фонду фундаментальних досліджень Держкомітету з питань науки і технологій "Дослідження процесів фазоутворення і дифузійного росту нових фаз у металевих системах" №2.3/290 (1994 -1996), комплексної програми фундаментальних досліджень "Наносистеми, наноматеріали і нанотехнології", код програмної класифікації 6541030 (2003-2004 р.р.).

У виконанні вказаних робіт автор приймав безпосередню участь і був відповідальним виконавцем або виконавцем по розділах, пов'язаних з дослідженням масопереносу в умовах ударної механічної та вибухової обробки, а також відповідальним виконавцем по розділах, пов'язаних з моделюванням процесів міграції атомів.

Мета і задачі дослідження. Мета роботи - ґрунтуючись на результатах фізичного експерименту і комп'ютерного моделювання, виявити загальні закономірності масопереносу в умовах різних видів імпульсної обробки, з'ясувати механізм міграції атомів і його взаємозв'язок з основними закономірностями деформації кристалічних ґрат металу.

Відповідно до поставленої мети в роботі було необхідно вирішити наступні наукові задачі:

1. За допомогою методу радіоактивних ізотопів установити вплив різних фізичних факторів (пружної деформації, імпульсного

механічного і вибухового навантажень, температури, різного вихідного структурного стану і розміру атома) на масоперенос у металах з кубічними ґратами в широкому діапазоні густини енергії впливу.

2. Дати аналітичний опис форми концентраційних розподілів, отриманих у результаті масопереносу в широкому діапазоні енергії імпульсної обробки.

3. Створити тривимірну молекулярно-динамічну модель, що дозволяє досліджувати на атомному рівні поведінку металів з кубічними ґратами в умовах дії імпульсного навантаження.

4. На атомному рівні методом молекулярної динаміки виявити закономірності деформації кристалічних ґрат монокристалів металів при стиску і розтязі.

5. За допомогою моделювання з'ясувати атомний механізм міграції атомів під час масопереносу в металах з кубічними ґратами в умовах ударної деформації.

Об'єкт дослідження – процес масопереносу і деформації металів з кубічними ґратами.

Предмет дослідження – на макроскопічному рівні: загальні закономірності масопереносу в умовах різних видів імпульсної обробки;

- на мікроскопічному рівні: поведінка атомів у металевих кристалах в умовах ударної деформації.

Відповідно до поставлених задач використовувалися такі *методи дослідження*:

- авторадіографічний та пошаровий метод дослідження рухливості атомів з використанням радіоактивних ізотопів;
- металографічний ;
- мікродюрOMETричний;
- рентгенографічний;
- комп'ютерне моделювання з використанням методу молекулярної динаміки.

Наукова новизна. У результаті рішення поставлених вище задач вперше отримані наступні основні наукові результати:

1. Вперше на основі аналізу форми концентраційних профілів, отриманих у результаті проникнення атомів радіоактивного покриття в об'єм матеріалу в процесі імпульсного навантаження показано, що зниження температури, збільшення густини дислокацій у вихідному стані і збільшення інтенсивності механічної обробки приводять до

підвищення ролі спрямованого переносу атомів у порівнянні з механізмом випадкових блукань.

2. У результаті молекулярно-динамічного моделювання кристалів металів із ГЦК і ОЦК ґратами встановлено, що наявність власного міжвузельного атома викликає утворення області спотворення кристала - кластера, що містить до 18 атомів. Це приводить до зменшення енергії активації самодифузії і визначає низькі значення передекспоненційного множника. При цьому в кристалі з більш щільно упакованими ГЦК ґратами число приналежних кластеру "активованих" атомів приблизно вдвічі перевищує таке для ОЦК кристала. Тому, на відміну від вакансійного механізму, для дифузійного переміщення міжвузельного атома в кристалі з ГЦК структурою потрібна менша енергія активації в порівнянні з ОЦК.

3. У зародженні центрів деформації нанокристалів металів в умовах одноосового, всебічного стиску і розтягу істотну роль грають флуктуації напружень. При цьому перевищення локального напруження над середнім може досягати 1,5 рази. Енергія імпульсного впливу, що вводиться в метал, розподіляється в кристалі нерівномірно, що сприяє утворенню міжвузельних атомів по недислокаційному механізму.

Практичне значення отриманих результатів. Отримані експериментальні і теоретичні результати, що описують закономірності процесів масопереносу і деформації металевих кристалів в умовах імпульсних впливів можуть бути корисними для фахівців, що працюють в області фізики твердого тіла, фізики металів і металознавства, а також технології механіко-хіміко-термічної обробки металів, оскільки дозволяють усвідомлено застосовувати їх при розробці сучасних технологій. Запропонований кластерний механізм дифузії, що пояснює низькі значення енергії активації міграції власних міжвузельних атомів, може бути використаний у радіаційному матеріалознавстві, коли дифузійні властивості є одним з визначальних факторів у питанні стабільності матеріалів.

Виявлені закономірності впливу температури відкривають можливість цілеспрямовано керувати масопереносом і оптимізувати процеси поверхневого легування й ударного зварювання. Запропоновано варіант імпульсної обробки, який полягає в тім, що під час механічного удару обмежується ступінь пластичної деформації

зразка для збільшення глибини масопереносу. Отримані в роботі закономірності деформування і граничних характеристик міцності металевих нанокристалів є складовою частиною тих знань, що дозволяють прогнозувати властивості композитів на їхній основі.

Наочність демонстрації отриманих результатів моделювання дифузії і деформації кристалів дає можливість їхнього використання в навчальному процесі для студентів.

Особистий внесок автора. Здобувачем безпосередньо виконано: постановка проблеми і вибір методів рішення наукових задач; усі модельні експерименти, включаючи розробку і тестування програмного забезпечення для моделювання методом молекулярної динаміки, аналіз і інтерпретацію отриманих результатів; аналітична обробка концентраційних профілів; металографічні і рентгенографічні дослідження, визначення густини дислокацій за допомогою рентгенівської дифрактометрії (крім заліза); частина досліджень по визначенню тривалості імпульсного навантаження. Основні експериментальні дослідження масопереносу з використанням методу радіоактивних ізотопів, дослідження масопереносу при імпульсному розряді хімічних джерел струму і дослідження тривалості вибухового навантаження виконані разом зі співавторами наукових праць. Усі наукові положення і висновки належать персонально автору дисертації.

У монографії (див. [1] у списку праць за темою роботи) розділ 4 написаний здобувачем, розділ 5 - у співавторстві з В.Ф. Мазанко, у розділі 3 брав участь у написанні підрозд.3.3. У роботах, виконаних у співавторстві (див. [1, 3-13, 15-20, 23-25] у списку публікацій по темі роботи) усі наукові результати, представлені в дисертації, отримані здобувачем особисто. Приведений у дисертації науковий матеріал не містить ідей і наукових розробок колег, у співавторстві з якими опубліковані роботи.

Співавторам належати результати інших досліджень, що наведені в публікаціях. Також вони брали участь в обговоренні експериментальних даних.

Апробація результатів роботи. Викладені в роботі результати були представлені та обговорені на національних та міжнародних конференціях, а також на семінарах:

1. XIV семінарі "Влияние высоких давлений на вещество", Бердянськ, 1991 р.
2. Конференції "Методы расчета энергетической структуры и

физических свойств кристаллов", Київ, 1991 р.

3. Конференції "Роль диффузии в образовании неразъемных соединений", Київ, 1992 р.

4. III Черкаському семінарі країн співдружності "Актуальные вопросы диффузии, фазовых и структурных превращений в сплавах", Сокирне, Черкаська обл., Україна, 1995 р.

5. Симпозіумі "Синергетика - 96" III, Москва, Имет РАН, 1996 р.

6. Міжнародної конференції "DIMAT - 96" Німеччина, Нордкірхен, 1996 р.

7. Міжнародної конференції "Mechanical engineering technologies' 97" (Болгарія, Софія, 1997 р.).

8. Міжнародному семінарі "Diftrans 1998", Сокирне, Черкаська обл., Україна, 1998 р.

9. Міжнародної конференції "DIMAT - 2000", Франція, Париж, 2000 р.

10. Міжнародному семінарі "Актуальные вопросы диффузии, фазовых и структурных превращений в сплавах", Сокирне, Черкаська обл., Україна, 2004 р.

11. Міжнародної конференції "Нансис 2004", Київ, 2004 р.

Результати дисертаційної роботи також доповідалися й обговорювалися на семінарах Інституту металофізики НАН України.

Публікації. Основний зміст дисертаційної роботи розкрито в публікаціях, серед них 1 монографія, 24 статті у фахових наукових журналах.

Структура дисертації. Загальний обсяг дисертації – 296 сторінок. Вона містить вступ, 5 розділів та основні висновки. Перший розділ присвячений огляду літератури. Другий – описує матеріали та методики досліджень. Інші три розділи містять оригінальну частину роботи. У дисертації розміщено 23 таблиці та 106 рисунків. Список літератури складається з 217 цитованих джерел.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** розкрито стан проблеми, її значущість, обґрунтовано актуальність роботи, сформульовано мету і задачі досліджень.

Перший розділ присвячено огляду літератури по даній тематиці. Розглянуто накопичений експериментальний матеріал, що досить повно характеризує явище аномального масопереносу в металах при імпульсних впливах. Сукупність цих результатів однозначно

підтверджує існування даного явища і свідчить про умови і характер його проявів. Існуючі феноменологічні моделі процесу дозволяють інтерпретувати експериментальні результати без пояснення механізму явища на атомному рівні. Однак фізична природа його дотепер не цілком ясна і для опису цього явища використовуються різні підходи, що зводяться до двох груп поглядів, що спираються на експериментальні результати.

Дифузійні підходи базуються на фактах: атомарного характеру міграції атомів в умовах імпульсної обробки, впливу природи проникаючого атома на його рухливість, впливу на аномальний масоперенос точкових дефектів і щільності пакування кристалічних ґрат, а також низької ефективної енергії активації міграції атомів, порівнянної з енергією міграції міжвузельних атомів, що послужило підставою для гіпотези про міжвузельну природу ефекту аномального масопереносу. Для пояснення глибин проникнення атомів, що експериментально спостерігаються (десятки мікрометрів), використовується уявлення про потік атомів під дією рушійної сили.

Бездифузійні підходи спираються на факти недифузійного по природі проникнення в матрицю великих сукупностей атомів, що переносяться, у виді часток чи окремих атомів. Ці підходи не виключають один одного, а лише припускають різні внески процесів дифузійної і недифузійної природи в сумарний масоперенос.

Розвиток теорії масопереносу гальмується недостатнім обсягом знань про природу масопереносу і зміну структури в зоні масопереносу на наноструктурному рівні під час імпульсного впливу. У зв'язку зі складністю експериментального дослідження таких процесів для вивчення механізму масопереносу останнім часом стали використовувати комп'ютерне моделювання. Розглянуто метод молекулярної динаміки, що дозволяє вивчати не тільки дифузійні процеси на рівні атомів, але і поведінку металу на нанометровому рівні під час деформації в умовах імпульсної обробки. Це дозволяє вперше провести вивчення кожного з цих процесів окремо, а потім досліджувати їх у взаємозв'язку, оскільки під час експериментальних досліджень міграція атомів і процеси деформації відбуваються одночасно.

У такий спосіб з'являється можливість об'єднати експериментальні дослідження на макроскопічному рівні з наноструктурними, що підготовляє підґрунтя для подальшого практичного застосування масопереносу.

Другий розділ дисертації присвячено розгляду шляхів та методів досліджень. Для одержання більш повної картини явища, що досліджується, в роботі використовувалися фізичні експериментальні методи дослідження і комп'ютерне моделювання з використанням методу молекулярної динаміки. Тому в цьому розділі розглянуті методичні питання, пов'язані як з експериментальними дослідженнями, так і з моделюванням процесів, що відбуваються в металах при імпульсному деформуванні. Для спрощення аналізу результатів, що отримані, експериментальні і модельні дослідження масопереносу і поведінки матеріалів при імпульсних впливах були проведені на чистих металах з кубічними ґратами. Для цього були обрані залізо, мідь і молібден.

У *першому підрозділі* розглянуті способи імпульсної обробки, що використовувалися в експериментах по вивченню масопереносу. Це обробка пружними хвилями за допомогою стиску газоподібного середовища, механічний удар, вибухове навантаження, що супроводжується генерацією плоскої ударної хвилі, а також опромінення металу імпульсами оптичного квантового генератора у режимі модульованої добротності. Показано, що обробка пружними хвилями, що не супроводжується помітною пластичною деформацією, не дозволяє використовувати для характеристики навантаження такий параметр, як швидкість деформації. Також розглянуті одноосьовий і всебічний стиск і розтяг з постійною швидкістю, які використовувалися при моделюванні процесів деформації. Таке навантаження аналогічне випробуванню в абсолютно жорсткій розривній машині.

Також розглянуто методи досліджень розподілу атомів, засновані на застосуванні радіоактивних ізотопів, такі як метод зняття шарів і авторадіографії, що використовувалися в роботі.

В *другому підрозділі* проведений вибір потенціалів взаємодії для моделювання методом молекулярної динаміки. Для перевірки впливу типу потенціалу розрахунки виконані з використанням парних і багаточасткових потенціалів. Для α -заліза був обраний парний потенціал Джонсона [1] і багаточастковий потенціал Фініса-Сінклера [2]. Для міді обраний сплайн-потенціал [3] рівноважного типу, створений на базі потенціалу Морзе і багаточастковий потенціал [4]. Для молібдену був обраний багаточастковий потенціал [2]. При використанні періодичних граничних умов дефекти можуть взаємодіяти зі своїми відображеннями, тому на розмір зразка L (u

будь-якому напрямку) накладалося обмеження $L > 2 \cdot r_c$, де r_c - радіус обрізання потенціалу.

Для розрахунку коефіцієнта дифузії при моделюванні використовується можливість простежити за переміщенням кожного атома. Коли по мірі зростання часу виміру сума зміщень атомів від положень рівноваги за рахунок дифузії стає більше, ніж обумовлена тепловими коливаннями атомів, то коефіцієнт дифузії стає постійною величиною, яка і є шуканим коефіцієнтом дифузії. Можна видозмінити алгоритм так, щоб не враховувати зміщення атомів від положень рівноваги за рахунок теплових коливань атомів. Оскільки вони не перевищують 10-15% від періоду ґратки, то підсумовування відбувається, якщо величина зміщення атома перевищує половину міжатомної відстані. У цьому випадку немає необхідності в тривалому проведенні експерименту для усунення впливу коливань атомів без перескоків, але вимагає введення критерію здійснення стрибка.

Для розрахунків, у яких використовуються координати атомів, на точність може впливати рух модельного кристала як цілого. Проведений аналіз впливу початкових умов на поведінку кристала при моделюванні методом молекулярної динаміки показав, що умову розподілу початкових швидкостей атомів $v_i=0$ можна застосовувати для забезпечення нерухомості кристала з дефектами під час експерименту. Це забезпечує достатню точність визначення коефіцієнтів самодифузії при наявності міжвузлових атомів i , на відміну від випадку завдання швидкостей відповідно до розподілу Максвела, дозволяє уникнути процедури по компенсації руху кристала в цілому. Однак така початкова умова може бути ефективно використана не завжди, наприклад, у тих випадках, коли досліджується кристал без дефектів з періодичними граничними умовами.

При використанні потенціалу Джонсона до температури ~ 700 К спостерігається рівнорозподіл енергії між потенційною і кінетичною відповідно до теореми віріала. Відхилення при більш високих температурах може бути пов'язане з ангармонізмом коливань.

Також в другому розділі приведені деякі тестові задачі. Вивчення структури кристала поблизу вакансії показує, що атоми першої координаційної сфери зміщуються до вакансії, тоді як атоми другої сфери - від вакансії, що відповідає даним інших авторів. Розрахунок теплових властивостей мікрокристала міді, що містить 1372 атома дає близьке до реального значення теплоємності, але занижені значення

температури і прихованої теплоти плавлення. Це пов'язано з тим, що значна частина атомів знаходиться на поверхні мікрочастинки і не має повного набору атомних зв'язків. Використання потенціалу Джонсона дає для заліза значення модуля всебічного стиску $K=188$ ГПа при температурі 300 К, що на $\sim 8\%$ вище експериментального значення ($K=173$ ГПа).

У **третьому розділі** дисертації розглянуто результати експериментальних досліджень загальних закономірностей масопереносу в металах при імпульсних впливах різної інтенсивності.

У *першому підрозділі* вперше вивчений спільний вплив температури і напружень у вихідному стані на масоперенос при механічному ударі. Виявлено, що одночасне зниження температури і збільшення напружень чинить гальмуючу дію на масоперенос у більшому ступені, ніж кожного з них по окремоті (рис.1). Це виявляється справедливим як для ОЦК, так і для ГЦК металів.

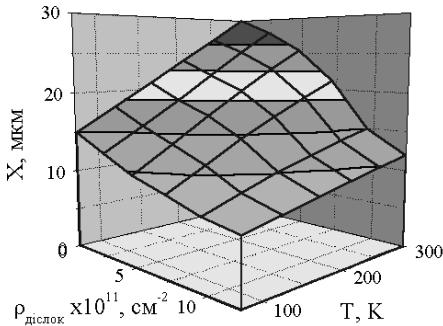


Рис.1. Глибина зони масопереносу в залізі в залежності від температури та густини дислокацій у вихідному стані до масопереносу.

Значна увага приділена питанню про роль пластичної деформації в масопереносі. Оригінальні і літературні дані свідчать, що при імпульсних впливах, які супроводжуються пластичною деформацією, збільшення дефектності структури у вихідному стані сповільнює процеси масопереносу атомів. Якщо ж масоперенос при імпульсному впливі відбувається в умовах, коли така деформація відсутня, то зі збільшенням густини дефектів у вихідному стані швидкість проникнення атомів зростає. Так, при роботі імпульсних хімічних

джерел струму відбувається відновлення катодного матеріалу, що супроводжується проникненням катіонів літію. Час роботи таких джерел складає від 10 мкс до хвилин. Швидкість масопереносу літію в об'ємі електрода в значній мірі визначає електричні характеристики джерел струму. Тому вивчення їхніх електричних характеристик подає інформацію про швидкість масопереносу. Показано, що швидкість проникнення катіонів літію в нестехіометричні оксидні сполуки, що характеризуються великою кількістю дефектів, вище в порівнянні з стехіометричними. Аналогічний результат отриманий, якщо дефекти структури створювалися не за допомогою зміни складу сполуки, а за допомогою попередньої ударної обробки катодної маси для збільшення мікронапружень у вихідному стані.

В *другому підрозділі* вивчений вплив розміру проникаючого атома (Ni, Co, Fe, Nb, Sn, Tl, Cs) при 300 K на його рухливість у міді в умовах імпульсного механічного навантаження. Виявлено, що зі збільшенням розміру атома його рухливість зменшується. Це узгоджується з літературними даними про аналогічну залежність у ОЦК залізі. Порівняння з літературними даними по дифузії атомів втілення (H, C, N, O, B) і атомів заміщення (Ni, Co, Cr, Fe, Nb, Ga, As, Hg, Tl) у міді при 1273 K свідчить, що міграція атомів заміщення під дією імпульсної обробки має ті ж закономірності, що й у випадку дифузії атомів втілення без імпульсного впливу. Це дає підстави вважати, що під дією імпульсного навантаження міграція атомів заміщення здійснюється за участю міжвузельних атомів. Це справедливо як для металів з ОЦК ґратами, так і з ГЦК.

Третій підрозділ. Вперше запропоновано характеризувати різні види впливів по такому параметру, як густина енергії. Це, на відміну від швидкості деформації, яка раніше використовувалася для цих цілей, дозволяє порівнювати різні види навантаження, поза залежністю від того, чи є присутня при цьому пластична деформація. Аналіз оригінальних і літературних даних показав, що залежність коефіцієнтів масопереносу для заліза при 300 K в діапазоні густини енергії від 5 до 10^2 Дж/см² має вигляд: $D = 1,8 \cdot 10^{-11} \cdot E^{4,8}$, де D - коефіцієнт масопереносу, см²/с, E - густина енергії імпульсного впливу, Дж/см². При більшій густині енергії коефіцієнти масопереносу в міді і залізі прямо пропорційні густини енергії: $D = 3,3 \cdot 10^{-4} \cdot E$. Така зміна залежності говорить про те, що енергія, яка вводиться в кристал, зі збільшенням інтенсивності впливу в меншій мірі витрачається на реалізацію процесу масопереносу. Очевидно, це

пов'язано з тим, що енергія, що вводиться в кристалічні ґрати, витрачається додатково на процеси, не пов'язані з масопереносом, наприклад на нагрівання, стиск речовини, на утворення великої кількості дефектів, що не здатні брати участь у переносі або ж є перешкодами для атомів, що рухаються. Наприклад, ударна хвиля амплітудою 50 ГПа в міді викликає розігрів матеріалу до 720 K, у той час як нагрів металу за рахунок навантаження падаючим тягарем не перевищує десятків градусів.

Не менш важливим, ніж порівняння видів впливу, є питання про те, чим характеризувати масоперенос при різних імпульсних впливах. Для порівняння результатів масопереносу звичайно використовуються глибина проникнення атомів чи ефективний коефіцієнт масопереносу. Однак вони прямо нічого не говорять про механізм процесу. Для оцінки внеску різних механізмів у процес масопереносу запропоновано використовувати форму концентраційного розподілу, що формується в результаті імпульсного впливу. Апроксимація аналітичною функцією профілів, отриманих при різних видах обробки, показала, що концентраційні криві можна описувати залежністю, що має вигляд:

$$C = C_0 \exp(-aX^n), \quad (1)$$

де C - концентрація, X - глибина. По показнику ступеня n можна судити про внесок у процес масопереносу механізму випадкових блукань або спрямованого переміщення атомів під дією значної рушійної сили. Для випадку класичної дифузії, коли реалізується механізм випадкових блукань, навіть при наявності невеликої рушійної сили (у магнітному полі, при електропереносі і ін.) показник ступеня n дорівнює 2. При імпульсних впливах його величина змінюється: 1,7 - 2 для обробки пружними хвилями в умовах стиску газоподібного середовища, 1,5 - 1,8 при ударному механічному навантаженні, 0,8-1,4 при вибуховій обробці. При $n=1$ рівняння (1) набуває вигляд, що відповідає закону поглинання в речовині: $I=I_0 \exp(-kl)$ де l - товщина шару. У зв'язку з цим можна припустити, що при високоенергетичних імпульсних впливах ($n=1$) величина рушійної сили настільки велика, що внесок механізму випадкових блукань стає малим, при цьому відбувається в основному спрямований перенос атомів. Таким чином, по величині показника ступеня в (1) можна судити про роль механізму випадкових блукань і спрямованого переносу атомів при різних видах імпульсної обробки.

Зниження температури, збільшення густини дефектів у вихідному

стані, а також збільшення густини енергії навантаження в діапазоні $0,1 - 2 \times 10^3$ Дж/см² приводить до зростання ролі спрямованого переносу атомів у порівнянні з механізмом випадкових блукань, про що можна судити по зменшенню показника ступеня n . Масоперенос у залізі характеризується більш низькими значеннями n у порівнянні з міддю.

Четвертий підрозділ. На основі співставлення оригінальних і літературних даних зроблений висновок, що гальмуючий вплив підвищеної густини дислокацій у вихідному стані на масоперенос в умовах імпульсних навантажень у діапазоні густини енергії впливу $10 - 2 \times 10^3$ Дж/см² можна пов'язати з:

а) зменшенням ефективності утворення міжвузельних атомів при підвищеній густині дислокацій;

б) гальмуючим впливом підвищеної густини дислокацій у вихідному стані на проникаючі атоми.

Аналіз результатів у широкому діапазоні густини енергії навантаження свідчить про те, що зі збільшенням енергії впливу росте величина енергії, що передається атомам за рахунок дії рушійної сили. Оцінка величини цієї енергії показує, що вона не є малою в порівнянні з kT при вибуховій обробці а також в умовах механічного удару при $T=77$ К, на відміну від дифузії в постійному магнітному полі, при електропереносі і т.д. Наявність значної рушійної сили викликає спрямоване переміщення атомів. При цьому змінюється механізм процесу їхнього перерозподілу. Про це свідчить зміна показника ступеня при X у формулі (1) у бік зменшення при збільшенні інтенсивності навантаження.

Під час експериментального вивчення масопереносу не вдається провести роздільне вивчення процесів деформації і процесів переносу атомів з метою встановлення внеску кожного з них у міграцію атомів. Однак це можна здійснити шляхом моделювання. У **четвертому розділі** дисертації за допомогою моделювання досліджені процеси деформації при імпульсному розтягу ідеальних кристалів молібдену і α -заліза, лінійні розміри яких близько 10 нм. Такі об'єкти близькі до реально існуючих нанокристалів. Проте отримані результати можуть бути застосовані не тільки до нанокристалів. Можна вважати, що нанокристал є також представницьким об'ємом для макрокристала, що не містить дефектів.

Швидкість розтягу при моделюванні складала 10 - 30 м/с, що на порядок менше швидкості релаксаційних процесів у кристалі і на два

порядки менше швидкості поширення пружних хвиль. Аналіз отриманих при температурі 30 K залежностей “напруження - деформація” в умовах одноосового розтягу циліндричних нанокристалів показує, що пластична деформація здійснюється шляхом перебудови структури після втрати стійкості пружно деформованих кристалічних ґрат. При цьому величина максимальної пружної деформації до початку пластичної визначається характером перебудови кристалічної структури, яка багато в чому залежить від вихідної орієнтації кристала. Найбільше значення деформації і напруження до початку перебудови структури забезпечує вихідна орієнтація нанокристалу $\langle 111 \rangle$, а найменше – орієнтація $\langle 100 \rangle$. Для заліза $\sigma^{\langle 111 \rangle} = 19$ ГПа, $\sigma^{\langle 100 \rangle} = 12,6$ ГПа, для молібдену $\sigma^{\langle 111 \rangle} = 43$ ГПа, $\sigma^{\langle 100 \rangle} = 22$ ГПа. Ця закономірність спостерігається при використанні парного і багаточасткового потенціалу. Критичні напруження і деформації, що передбачаються *ab initio* розрахунками, систематично перевищують отримані вище значення для нанокристалів. Це пов'язано з тим, що втрата стійкості і початок деформації нанокристала відбувається не у всьому його об'ємі одночасно, а ініціюється у вузькій зоні нанокристалу. Основною причиною цього ефекту локалізації є флуктуації напружень, пов'язані з тепловими коливаннями атомів. Це виявляється і при всебічному розтязі кристала з кубічною симетрією.

У результаті моделювання отримані досить високі значення напруження до початку деформації в порівнянні з експериментальними даними для макроскопічних полікристалічних і монокристалічних зразків. Це пов'язано з тим, що в моделюванні розглядається тільки нанометровий структурний рівень. Більш високий структурний рівень, що включає дислокації, субмежі і межі зерен і т.д., приводить до різкого зменшення напруження втрати стійкості. Якщо ж виключити його вплив, то спостерігається значно краще узгодження з експериментом. Наприклад, по літературним даним для нитковидних кристалів заліза експериментально отримане значення межі міцності на розтяг $\sigma_0 = 13$ ГПа, що узгоджується з отриманими в результаті моделювання результатами. Це ще раз підтверджує досить гарні властивості парного потенціалу [1]. Спостереження за перебудовою атомів у процесі моделювання показує, що пластична деформація бездефектного нанокристалу металу не пов'язана з масопереносом на відстані, більше періоду ґратки.

При моделюванні враховувалася структурна ієрархія напружень. Розраховувалися напруження ξ_{ij} , що діють у межах об'єму Ω , що приходить на один атом (мікронапруження або локальні напруження) і середні по перетину зразка напруження σ_{ij} .

$$\xi_{ij}^k = \frac{1}{\Omega^k} \sum_{m(\neq k)}^n f_i^{km} r_j^{km}, \quad (2)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k^N \xi_{ij}^k, \quad (3)$$

де k - атом, що розглядається; m - сусідні атоми; f_i^{km} - вектор сили між парою атомів; r - радіус-вектор між атомами; n - кількість сусідніх атомів; N - загальна кількість атомів у нанокристалі; Ω^k - атомний об'єм; i, j - індекси тензора напружень.

Макроскопічне напруження σ_{ij} , тобто середнє по перетину зразка, що розраховується по формулі (3), різко падає (на 70 - 90%) у момент початку пластичної деформації. У той час як максимальні мікронапруження (чи локальні напруження), що розраховуються по формулі (2), продовжують зростати до руйнування.

Моделювання всебічного розтягу кулі молібдену показало, що граничне збільшення об'єму при розтязі може досягати двох разів тільки в об'ємі, який по величині сумірний з атомним.

Результати, отримані моделюванням на нанометровому рівні, визначають поведінку кристала на макроскопічному рівні. Однак їх не можна лінійно екстраполювати на макроскопічний, тому що на макроскопічному рівні в процесах деформування, як і в процесах масопереносу, можуть відігравати роль і інші структурні складові, вплив яких ще не розглядався в моделі. Наприклад, межі зерен, дислокації і їхні скупчення і т.д.

П'ятий розділ присвячений вивченню методом молекулярної динаміки рухливості атомів при імпульсному стиску. У *першому підрозділі* вивчена поведінка кристалів під час проходження модельної ударної хвилі (масова швидкість ~ 1000 м/с, $\varepsilon \sim 10^5 - 10^6$ с⁻¹). При моделюванні проходження ударної хвилі з шириною фронту кілька міжатомних відстаней і амплітудою до 50 ГПа в ідеальних бездефектних металевих кристалах з кубічними ґратами з періодичними граничними умовами не спостерігається утворення

точкових дефектів і явище масопереносу. Видимо, у цих умовах, коли не відбувається зародження зсувів, моделюється не ударна хвиля, а поширення аномальне сильного пружного збурювання.

В *другому підрозділі* розглянута деформація нанокристалів в умовах механічного удару (швидкість ~ 10 м/с). Виявлено, що при одноосьовому ударному стиску втрата стійкості нанокристалу (і наступне скидання напруження) відбувається внаслідок її локалізації і, як наслідок, пластичної деформації у вузькій області нанокристалу, що схоже на поведінку в умовах одноосьового розтягу. Центральна симетрія кривих напруження-деформація для стиску і розтягу ОЦК металів (рис.2) у кристалографічних напрямках: стиск - $\langle 100 \rangle$, розтяг - $\langle 111 \rangle$ і стиск - $\langle 110 \rangle$, розтяг - $\langle 100 \rangle$, відповідно, пов'язана з роботою однакових у цих парах механізмів початку пластичної деформації. В умовах всебічного стиску кулі молібдену отримане значення стискальності 285 ГПа, тоді як за літературними даними 270-280 ГПа. Це також свідчить про гарні властивості багаточасткового потенціалу [2].

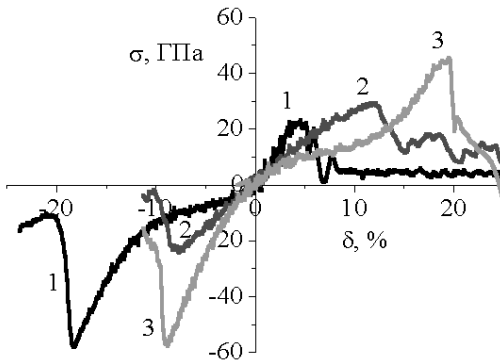


Рис. 2. Залежності напруження - відносна деформація нанокристалів молібдену різних орієнтацій при $T=30$ К. 1- $\langle 100 \rangle$, 2- $\langle 110 \rangle$, 3- $\langle 111 \rangle$.

У *третьому підрозділі* розглянута структура імпульсу стиску, виходячи з експериментальних даних. Показано, що імпульси можна умовно розділити на 3 частини: фронт зростання тиску з великим градієнтом, період майже постійного тиску й період зниження тиску. В ударній хвилі 50 ГПа ширина фронту становить $\sim 10^{-7}$ с. При механічному ударі $\sim 10^{-4}$ с, тоді як загальна тривалість з урахуванням багатоволнової конфігурації може досягати 0,1 с.

У *четвертому підрозділі* розглянуті можливі джерела точкових

дефектів. Моделювання деформування бікристалів молібдену показало, що поблизу межі зерна починається перебудова атомів з формуванням неупорядкованої структури. Це супроводжується локальним підвищенням температури на кілька сотень градусів. Висока температура і перебудова атомів може сприяти народженню пар Френкеля. У роботах, присвячених дослідженню масопереносу, цей механізм раніше не розглядався як можливе джерело міжвузельних атомів. Максимальне напруження в бікристалі, що досягається до початку втрати стійкості (перебудови) менше, ніж напруження втрати стійкості при стиску монокристалів молібдену з орієнтацією $\langle 100 \rangle$ чи $\langle 110 \rangle$. Тобто наявність межі не дозволяє досягти напруження втрати стійкості навіть самого слабкого монокристала з орієнтацією $\langle 110 \rangle$. Вищесказане не означає, що не працюють механізми генерації точкових дефектів, міжвузельних атомів зокрема, які пов'язані з рухом дислокацій і розглядалися в літературі. Однак механізм, пов'язаний з дислокаціями, генерує дефекти порівняно рівномірно в об'ємі матеріалу. Тоді як локалізація пластичної деформації у визначених зонах зразка забезпечує виникнення дефектів поблизу існуючих дефектів структури кристала. У тому числі поблизу меж зерен і покриття, що містить мічені атоми.

У *п'ятому підрозділі* наведені результати по вивченню дифузійної рухливості власних міжвузельних атомів без зовнішніх впливів у кристалах ГЦК і ОЦК металів. Показано, що при концентрації міжвузельних атомів 1:2000 дефекти майже не "почувають" один одного. На рис.3 показана отримана температурна залежність

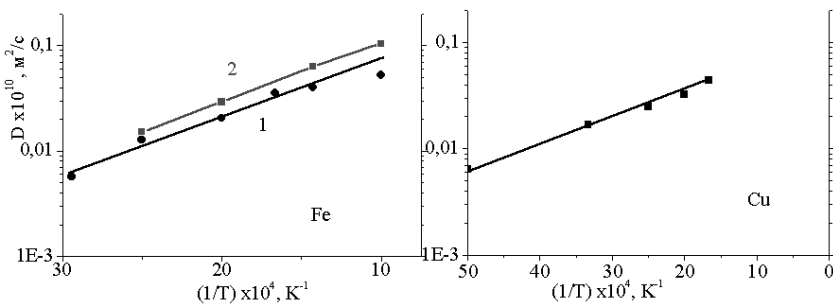


Рис.3. Вплив температури на коефіцієнт самодифузії при наявності міжвузельних атомів в концентрації 1:2000. 1 - парний потенціал, 2 - багаточастковий.

коефіцієнтів самодифузії при наявності міжвузельних атомів. Для α -заліза передекспоненційний множник $D_0 \approx 3 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$, енергія активації міграції $E = 0,11 \text{ еВ}$. Для міді $D_0 = 1 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$, $E = 0,048 \text{ еВ}$. На відміну від стаціонарної дифузії по вакансійному механізмі, виявлена більш висока рухливість атомів у кристалі з більш щільно упакованими ГЦК ґратами в порівнянні з ОЦК при $T < 0,5T_{пл}$, що узгоджується з експериментальними даними, отриманими в умовах імпульсного навантаження.

Порівняння розрахованих і експериментальних коефіцієнтів самодифузії в залізі приведено на рис.4. Видно, що при кімнатній температурі існує величезна, близько 40 порядків, різниця між коефіцієнтом дифузії в стаціонарних умовах (рис.4, крива 2) і значеннями D при ударному навантаженні (крива 3). Результати

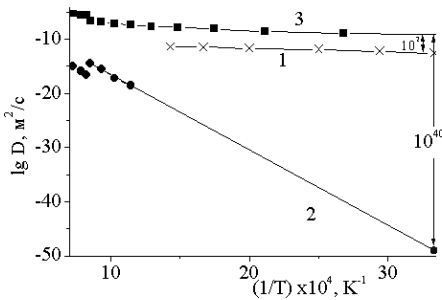


Рис.4. Коефіцієнти самодифузії при наявності міжвузельних атомів (1), по вакансійному механізмі (2) і експериментальні значення D_{Fe} при імпульсному навантаженні 20 с^{-1} (3).

моделювання (рис.4, крива 1) показують, що припущення про існування власних міжвузельних атомів зменшує цю різницю на 38 порядків: з 10^{40} до 10^2 . При цьому спостерігається практично рівнобіжний хід кривих для ударного навантаження і результатів моделювання. Це говорить про те, що модель, яка враховує існування власних міжвузельних атомів, дає в основному правильний механізм масопереносу при імпульсному механічному навантаженні. При кімнатній температурі ті 5% розбіжності, що залишилися (10^2 з 10^{40}), характеризують внесок у масоперенос неврахованих поки що факторів, а саме - вплив процесу деформації, роль рухливих дислокацій, можливу роль вакансій і т.д.

У результаті моделювання встановлено, що наявність власного міжвузельного атома (який частіше знаходиться в гантельній

конфігурації) викликає утворення області спотворення кристала - кластера, що містить до 18 атомів. Приналежність атомів до такого кластера визначалася за допомогою енергетичної характеристики:

$$\sigma^k = \sqrt{\sum_{x,y,z} (\varepsilon_{ii}^k)^2},$$

оскільки вона пов'язана з надлишковою енергією пружних деформацій

ΔU_σ : $\Delta U_\sigma = \frac{\sigma^2}{2E}$, де E - модуль пружності. У кристалі з більш щільно

упакованими ГЦК ґратами число приналежних кластеру "активованих" атомів приблизно вдвічі перевищує таке для ОЦК кристала. Тому, на відміну від вакансійного механізму, для дифузійного переміщення міжвузельного атома в кристалі з ГЦК структурою потрібна менша енергія активації міграції в порівнянні з ОЦК.

Використовуючи ідею Френкеля про кореляцію самодифузії і плавлення вдається пояснити низьке значення енергії активації міграції. При дифузійному обміні вакансії з атомом у перехідному стані усередині кристала як би з'являється "крапелька" рідини з декількох атомів, що оточують вакансію. Тоді енергія активації самодифузії більшості металів, що по численним експериментальним даним $E=15 \cdot \lambda$, де λ - теплота плавлення, говорить про те, що число атомів у такій розплавленій області дорівнює 15, стільки їх знаходиться в одній-двох координаційних сферах навколо вакансії. У нашому випадку, при наявності власного міжвузельного атома, немає необхідності в "плавленні" цих 15 атомів. Як було показано вище в результатах моделювання, приблизно таке число їх уже знаходиться в кластері. Це і дає істотне зменшення енергії активації міграції при наявності міжвузельних атомів E_m^i у порівнянні з вакансійним механізмом.

Низьке значення передекспоненційного множника D_0 можна пояснити в припущенні про зменшення ентропії $\Delta S^m < 0$ під час дифузійного стрибка й врахуванні групового характеру переміщення n атомів: $D_0 = \gamma \cdot \Delta^{-2} \cdot v \cdot \exp(n\Delta S^m/k)$. Це нагадує модель локального упорядкування при дифузійному стрибку в аморфних сплавах. Однак, на відміну від аморфного сплаву, у даному випадку мова йде про невелику область у кристалі поблизу власного міжвузельного атома. Зменшення ентропії може бути викликане також зміною фононного спектра кристала (у високотемпературному гармонійному

наближенні): $\Delta S^f = k_B \sum_i \ln(\omega_{0i} / \omega_i)$, де ω_{0i} і ω_i - власні частоти

кристала при положенні міжвузельного атома в рівноважному положенні і при стрибку. Якщо відстань до найближчих сусідів зменшується в порівнянні з його рівноважним положенням, то в його околиці силові постійні ґрат і частоти коливань сусідів будуть зростати, тому стрибок супроводжується $\Delta S^f < 0$.

Шляхом комп'ютерного моделювання встановлено, що елементарний дифузійний стрибок атома відбувається за час, який на порядок перевищує період коливань атомів у металі. У перехідному стані відбувається періодична зміна мікронапружень в об'ємі, що займає міжвузельний атом (рис.5). Це свідчить про те, що відбувається багаторазова взаємодія атома з його сусідами під час дифузійного стрибка. При цьому максимальна швидкість руху атома складає ~ 200 - 400 м/с.

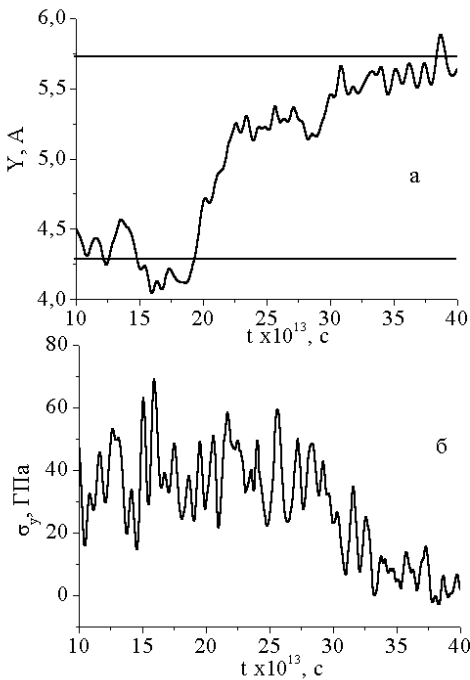


Рис.5. Зміна координати (а) і мікронапружень σ_y (б) при стрибку міжвузельного атома в α -залізі при 500 К. Розрахунок з використанням парного потенціала [1].

Значення розрахованої енергії активації і передекспоненційного множника (з урахуванням концентрації міжвузельних атомів)

узгоджуються з даними розрахунків інших авторів і з експериментальними дослідженнями міжвузельних атомів в опромінених чистих металах.

Моделювання показало, що існування зони спотворення кристала навколо власного міжвузельного атома приводить до притягання до нього інших міжвузельних атомів. Така конфігурація виявляється більш вигідною. Значення ентальпії активації утворення рівноважної гантельної конфігурації для одного міжвузельного атома в α -залізі дорівнює 4,6 еВ, а для пари сусідніх гантелей 4,1 еВ в розрахунку на один атом. Це сприяє стабілізації дефектів, що утворилися при народженні пари Френкеля. Тому в процесі масопереносу при ударному механічному і вибуховому навантаженні можуть брати участь не тільки одиночні міжвузельні атоми, але і їх більш стійкі скупчення.

Шостий підрозділ присвячений моделюванню поведінки міжвузельних атомів при імпульсному стиску. Показано, що градієнт тиску у фронті зростання тиску викликає збільшення коефіцієнта дифузії D_i у напрямку проходження хвилі від 3 до 10 разів. Високий постійний тиск 50 ГПа зменшує D_i приблизно в п'ять разів.

У *сьомому підрозділі* приведені експериментальні літературні дані про поведінку атомів втілення під дією імпульсу стиску. Збільшення їхньої рухливості в цих умовах можна пов'язати з тим, що імпульсний вплив приводить до утворення в металі власних міжвузельних атомів. Маючи дуже високу рухливість, вони активізують переміщення й атомів втілення. Однак не можна виключити, що процеси пластичної деформації будуть вибірково діяти на атоми втілення, активізуючи їхнє переміщення.

У *восьмому підрозділі* розглянутий вплив температури на величину напруження в імпульсі стиску. Виявлено, що підвищення температури знижує напруження, що досягаються до початку деформації. Це може зменшувати величину рушійної сили, що викликає спрямований рух атомів.

У *дев'ятому підрозділі* розглянутий вплив температури на масоперенос. Результируючий вплив температури визначається як результат спільної дії двох процесів. Зниження температури зменшує рухливість міжвузельних атомів. У той же час, як показано вище, зменшення температури підвищує напруження в кристалі при імпульсному впливі і сприяє росту величини рушійної сили, що викликає спрямоване переміщення атомів.

На підставі отриманих результатів у *десятому підрозділі* оцінена глибина масопереносу за рахунок точкових дефектів і проведене порівняння з експериментальними даними. Потік атомів j при дії сили F :

$$j = -D \cdot c \cdot h \left(\frac{Fa}{2kT} \right) \frac{dc}{dx} + 2 \frac{cD}{a} \operatorname{sh} \left(\frac{Fa}{2kT} \right).$$

Якщо сила не дуже мала, наприклад $Fa \sim 2kT$, то першим доданком через $c/a \gg dc/dx$ можна зневажити. Тоді середня швидкість атомів:

$$v = \frac{j}{c} \approx \frac{2D}{a} \cdot \frac{Fa}{2kT}.$$

Тут використовується розраховане вище значення D при наявності міжвузельних атомів. Для вибуху $v = 0,1$ м/с, а для механічного удару $v = 0,01$ м/с.

Якщо прийняти, що час дії сили обмежено тільки фронтом зростання тиску (одиначним), то середня глибина проникнення для механічного удару складе 1 мкм. З урахуванням же многократності, одержуємо середньоквадратичну глибину до 10 мкм, а максимальна глибина буде в кілька разів більше. З урахуванням цього масоперенос за участю міжвузельних атомів під дією рушійної сили дає глибини масопереносу, що узгоджуються з експериментом, дивись табл.1.

Таблиця 1

Параметри імпульсних впливів і глибина проникнення атомів

Вид впливу	t , с	t фронту с	Глибина по D , мкм	Глибина по швидкості, мкм	Експерим. глибина, мкм
Лазерне	10^{-8}	10^{-8}	5×10^{-4}	—	1-5
Вибухове	10^{-6}	10^{-7}	5×10^{-3}	$10^{-2}-10^{-1}$	5-50
Ударне	$< 10^{-1}$	10^{-4}	0,5	1-10	10-100
Пружні хвилі	1	10^{-1}	1,5	—	50

Однак природа цієї рушійної сили вимагає додаткового вивчення. Для випадку ударної хвилі одержуємо глибини близько 10^{-2} - 10^{-1} мкм, що менше експериментально зафіксованих значень. Це може свідчити про більше значення рушійної сили в порівнянні з припущенням, зробленим вище, або ж про те, що значення часу чи швидкості масопереносу (руху атомів) необхідно уточнити в зв'язку з

неповним описом процесу масопереносу такою моделлю.

Одинадцятий підрозділ присвячений розгляду перспектив розвитку моделі. Обговорено можливий внесок у масоперенос переміщення міжвузельних атомів за рахунок взаємодії з дислокаціями, що рухаються.

ОСНОВНІ ВИСНОВКИ

Дисертацію присвячено дослідженню атомної природи міграції атомів у металевих кристалах в умовах імпульсної деформації.

Основні результати, отримані в дисертації такі:

1. З використанням методу молекулярної динаміки створена комп'ютерна модель для вивчення поведінки металів на атомному рівні під дією імпульсних навантажень. Показано, що завдання нульових значень початкових швидкостей атомів забезпечує нерухомість кристала з дефектами під час експерименту і дозволяє уникнути процедури по компенсації руху кристала в цілому, забезпечуючи необхідну точність визначення коефіцієнтів самодифузії при наявності міжвузельних атомів.

2. При імпульсних впливах, що супроводжуються пластичною деформацією, збільшення дефектності структури у вихідному стані сповільнює процеси масопереносу атомів. Якщо ж масоперенос при імпульсному впливі відбувається в умовах, коли така деформація відсутня, то зі збільшенням густини дефектів у вихідному стані швидкість масопереносу зростає. Це може бути пов'язане як з характеристиками імпульсного навантаження, протіканням процесів пластичної деформації, так і зі зміною механізму масопереносу.

3. Вперше проаналізований вплив розміру проникаючого атома на його рухливість у міді в умовах імпульсного механічного навантаження. Виявлено, що зі збільшенням розміру атома його рухливість зменшується. Це збігається з літературними даними про аналогічну залежність у ОЦК залізі. Порівняння з даними по дифузії атомів втілення й атомів заміщення свідчить, що міграція атомів заміщення під дією імпульсного впливу має ті ж закономірності, що й у випадку дифузії атомів втілення без імпульсного впливу. Це дає підстави вважати, що під дією імпульсного навантаження міграція атомів заміщення здійснюється за участю міжвузельних атомів, як у металах з ОЦК гратами, так і з ГЦК.

4. Запропоновано критерій для оцінки внеску різних механізмів у процес масопереносу в умовах імпульсного навантаження апроксимацією форми концентраційних профілів функцією $C = C_0 \cdot \exp(-aX^n)$. При $n \sim 2$ основна роль належить механізму випадкових блукань, при $n \sim 1$ - спрямованому переносу атомів за участю міжвузельних атомів за рахунок дії значної рушійної сили в умовах зовнішніх впливів.

5. Механізм пластичної деформації нанокристалу металу, що не містить дефектів, в умовах одноосьового імпульсного навантаження полягає в перебудові його кристалічної структури, не пов'язаної з міграцією атомів на відстані, більше періоду ґратки. Установлено, що типовою особливістю нанокристалів металів з кубічними ґратами є ефект різкого падіння (на 70-90%) напруження після початку пластичної деформації. При одноосьовому ударному навантаженні скидання напружень у нанокристалі відбувається внаслідок локалізації пластичної деформації у вузькій області кристала.

6. Процеси пластичної деформації з локальним підвищенням температури в умовах імпульсного впливу починаються поблизу меж зерен, субзерен і поверхні розділу, що можуть бути джерелами утворення міжвузельних атомів і пар Френкеля.

7. В результаті молекулярно-динамічного моделювання кристалів металів із ГЦК і ОЦК ґратами виявлено, що наявність власного міжвузельного атома викликає утворення області спотворення кристала - кластера, що містить до 18 атомів, що приводить до зменшення енергії активації самодифузії і визначає низькі значення передекспоненційного множника. При цьому в кристалі з більш щільно пакованими ГЦК ґратами число приналежних кластеру "активованих" атомів приблизно вдвічі перевищує таке для ОЦК кристала. Тому, на відміну від вакансійного механізму, для дифузійного переміщення міжвузельного атома в кристалі з ГЦК структурою потрібна менша енергія активації в порівнянні з ОЦК.

8. Шляхом комп'ютерного моделювання встановлено, що елементарний дифузійний стрибок атома відбувається за час, що на порядок перевищує період коливань атомів у металі. При цьому максимальна швидкість руху атома складає $\sim 200-400$ м/с.

9. Існування зони спотворення кристала навколо власного міжвузельного атома приводить до притягнення до нього інших міжвузельних атомів. Це сприяє стабілізації дефектів, що утворилися при народженні пари Френкеля. Тому в процесі масопереносу при

ударному механічному і вибуховому навантаженні можуть брати участь не тільки одиночні міжвузельні атоми, але і їх більш стійкі скупчення.

10. Зниження температури зменшує рухливість міжвузельних атомів. Разом з тим, зменшення температури при імпульсному впливі підвищує напруження в кристалі. Це сприяє росту величини рушійної сили, що викликає спрямоване переміщення атомів. Результируючий вплив температури на масоперенос визначається як результат спільної дії цих процесів.

11. Результати моделювання деформування на нанометровому рівні передбачає збільшення масопереносу в умовах існування високих напружень при відсутності інтенсивних процесів пластичної деформації, що узгоджується з результатами експериментальних досліджень впливу густини дислокацій на масоперенос на макроскопічному рівні. В силу чого, для забезпечення великої глибини масопереносу необхідно забезпечити високий рівень напружень при обмеженій величині пластичної деформації.

СПИСОК ЦИТОВАНИХ ПРАЦЬ

- [1] Johnson R.A. Interstitials and Vacancies in α -Iron //Phys.Rev.A.-1964.- V.134, № 5A. – P. 1329-1336.
- [2] Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical N-body potential for transition metals // Philosophical Magazine A. - 1984. - V. 50, № 1. - P. 45-55.
- [3] Ingle K.W., Perrin R.C., Schober H.R. Interstitial cluster in FCC metals // J. Phys. F: Metal Phys. – 1981.– 11, №6. - P.1161-1173.
- [4] Ackland G.J., Tichy G., Vitek V., Finnis M.W. Simple N-body potentials for the noble metals and nickel // Philosophical Magazine A. - 1987. - V.56, №6. - P.735-756.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЙНОЇ РОБОТИ

Монографія:

1. Миронов В.М., Мазанко В.Ф., Герцрикен Д.С., Филатов А.В..

Массоперенос и фазообразование в металлах при импульсных воздействиях. Самара, Самарский ун-т, 2001. - 232 с.

Статті у наукових фахових виданнях:

2. Филатов А.В. О возможных путях реализации процесса массопереноса в ударных волнах // Труды Тульского политехнического института. - 1989. - С. 85-92.
3. Зворыкин Л.О., Лободюк В.А., Румянцев Б.В., Фальченко В.М., Филатов А.В. Особенности массопереноса и структурных изменений в сплавах Co-Ni при прохождении ударных волн // Известия АН СССР. Металлы. - 1991. - №4. - С.158-160
4. Зворыкин Л.О., Румянцев Б.В., Фальченко В.М., Филатов А.В. Влияние шероховатости поверхности на массоперенос в меди под действием ударных волн // Металлофизика. - 1991.- Т. 9, №4. - С.126-128.
5. Дубик А., Зворыкин Л.О., Овсик Я., Фальченко В.М., Филатов А.В. Особенности массопереноса железа и никеля в металлах при прохождении ударных волн, генерированных импульсным излучением // Металлофизика. - 1992.- Т. 14, №1. - С.46-49
6. Зворыкин Л.О., Фальченко В.М., Румянцев Б.В., Филатов А.В. Массоперенос никеля в монокристаллах молибдена при прохождении ударных волн // Металлофизика. - 1993. - Т. 15, №3. - С.97-98.
7. Погорелов А.Е., Филатов А.В. Моделирование динамики нагрева металлов импульсным оптическим квантовым генератором // Металлофизика и новейшие технологии. - 1994. - Т. 16, №8. - С.75-78.
8. Зворыкин Л.О., Фальченко В.М., Филатов А.В. Особенности массопереноса в металлах и сплавах с различной исходной структурой при высокоскоростной деформации // Инженерно-физический журнал. - 1995. - Т. 68, №4. - С.605-611.
9. Вовк А.Я., Филатов А.В. Структура и электрофизические свойства реактивно напыленных тонких пленок хрома // Металлофизика и новейшие технологии. - 1995. - Т. 17, №7. - С.17-22.
10. Мазанко В.Ф., Ворона С.П., Филатов А.В. Перераспределение атомов в объеме металла в условиях импульсного воздействия // Металлофизика и новейшие технологии. - 1995. - Т. 17, №9. - С. 74-76.

11. Иванова Н.Д., Болдырев Е.И., Филатов К.В., Филатов А.В. Катодное внедрение лития в продукты неполного электровосстановления ионов меди // Электрохимия. - 1996.- Т. 32, №8. - С. 928 - 931.
12. Зворыкин Л.О., Филатов А.В. Влияние характеристик плоских ударных волн на массоперенос в металлах // Доповіді НАН України. - 1997, №2. - С.84-89.
13. Вовк А. Я., Филатов А. В. Рентгенографическое исследование фазового состава тонких реактивно напыленных пленок хрома // Металлофизика и новейшие технологии. – 1998. – Т. 20, № 1. – С. 17-20.
14. Филатов А.В. Моделирование микрокристалла меди методом частиц при нагреве и охлаждении // Вісник Черкаського університету. Серія “Фізико-математичні науки”. - 1999. - С. 97-101.
15. Кучук-Яценко С. И., Харченко Г. К., Фальченко Ю.В., Григоренко С. Г., Мазанко В. Ф., Филатов А.В. О неоднородности массопереноса в зоне соединения при ударной сварке стали в вакууме // Металлофизика и новейшие технологии. - 2000.- Т. 22, №10. - С. 63-66
16. Мазанко В. Ф., Филатов А. В., Иващенко Е. В., Миронов В. М. Влияние упругих волн на диффузию углерода в железе и его сплавах // Металлофизика и новейшие технологии. - 2000.- Т. 22, №11. - С.54-57.
17. Мазанко В. Ф., Филатов О. В., Иващенко С. В., Миронов В. М. Рухливість атомів заміщення в металах під дією пружних хвиль // Доповіді НАН України 2000.- №8. - С.77-78.
18. Mazanko V.F., Mironova T.F., Mironov V.M., Filatov A.V. Main trends in mass transfer of nickel in iron and copper under pulse effect // Металлофизика и новейшие технологии. - 2002.- Т. 24, №2. - С. 181-187.
19. Немошкаленко В. В., Арсенюк В. В., Мазанко В. Ф., Миронов В. М., Филатов А.В. Общие закономерности массопереноса при различных видах импульсного нагружения // Доповіді НАН України. - 2002.- №10. - С.76-79.
20. Котречко С. А., Мешков Ю. Я., Филатов А. В., Овсянников А. В. Деформация и разрушение нанокристаллов ОЦК металлов // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. 2004. - Т. 2, вып.1. - С.227- 243.

21. А. В. Филатов. Образование межузельных атомов в металлах в условиях импульсного сжатия // Доповіді НАН України. - 2004.- №9. - С.80-82.
22. Филатов А.В. Влияние типа кристаллической решетки на диффузионную подвижность междоузельных атомов // Вісник Черкаського Університету. Серія "Фізико-математичні науки". - Вип. 62, 2004. - С. 100-109.
23. Котречко С. А., Мешков Ю. Я., Филатов А. В., Овсянников А. В. Моделирование деформирования и разрушения нанокристаллов ОЦК-металлов // Металлофизика и новейшие технологии. - 2004.- 26, №6. - С.841-850.
24. Котречко С. А., Филатов А. В., Овсянников А. В. Особенности пластической деформации нанокристаллов молибдена // Металлофизика и новейшие технологии. - 2004.- 26, №11. - С.1475-1482.
25. Миронова Т.Ф., Миронов В.М., Мазанко В.Ф. Филатов А.В. Массоперенос в титане и сплавах железо-титан в условиях обработки упругими волнами // В сб.: Энергосберегающие технологии механизации сельского хозяйства. Самара, - 1998. - С. 117-122.

АНОТАЦІЯ

Філатов О.В. Міграція атомів при ударній деформації ідеальних металевих кристалів. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.13 – фізика металів. Інститут металофізики імені Г.В. Курдюмова Національної академії наук України, Київ, 2005.

Грунтуючись на результатах фізичного експерименту і комп'ютерного моделювання, в дисертаційній роботі досліджені загальні закономірності масопереносу в умовах різних видів імпульсної обробки, вивчено механізм міграції атомів і його взаємозв'язок з основними закономірностями деформації кристалічних ґрат металу.

Запропоновано критерій для оцінки внеску різних механізмів у процес масопереносу в умовах імпульсного навантаження апроксимацією форми концентраційних профілів функцією $C = C_0 \cdot \exp(-aX^n)$. При $n \sim 2$ основна роль належить механізму випадкових блукань, при $n \sim 1$ - спрямованому переносу атомів за участю міжвузельних атомів за рахунок дії значної рушійної сили в умовах зовнішніх впливів.

В результаті молекулярно-динамічного моделювання кристалів металів із ГЦК і ОЦК ґратами виявлено, що наявність власного міжвузельного атома викликає утворення області спотворення кристала - кластера, що приводить до зменшення енергії активації самодифузії і визначає низькі значення передекспоненційного множника. При цьому в кристалі з більш щільно пакованими ГЦК ґратами число приналежних кластеру "активованих" атомів приблизно вдвічі перевищує таке для ОЦК кристала. Тому, на відміну від вакансійного механізму, для дифузійного переміщення міжвузельного атома в кристалі з ГЦК структурою потрібна менша енергія активації в порівнянні з ОЦК

Ключові слова: дифузія, масоперенос, моделювання, молекулярна динаміка, міжвузельні атоми, кластер, точкові дефекти, удар, деформація.

АННОТАЦИЯ

Филатов А.В. Миграция атомов при ударной деформации идеальных металлических кристаллов. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.13 – физика металлов. Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова Национальной академии наук, Киев, 2005.

Диссертационная работа посвящена исследованию общих закономерности массопереноса в металлах в условиях различных видов импульсного воздействия, а также изучению механизма миграции атомов и его взаимосвязи с основными закономерностями деформации кристаллической решетки металла с помощью экспериментальных исследований и компьютерного моделирования методом молекулярной динамики.

Обнаружено, что при импульсных воздействиях, сопровождающихся пластической деформацией, увеличение дефектности структуры в исходном состоянии замедляет процессы массопереноса атомов. Если же массоперенос при импульсном воздействии происходит в условиях, когда такая деформация отсутствует, то с увеличением плотности дефектов в исходном состоянии скорость массопереноса возрастает.

Предложен критерий для оценки вклада различных механизмов в процесс массопереноса в условиях импульсного воздействия аппроксимацией формы концентрационных профилей функцией $C = C_0 \exp(-aX^n)$. При $n \sim 2$ основная роль принадлежит механизму случайных блужданий, при $n \sim 1$ - направленному переносу атомов с участием междоузельных атомов за счет действия значительной движущей силы в условиях внешних воздействий. На основе анализа формы концентрационных профилей, полученных в результате проникновения атомов радиоактивного покрытия в объем материала показано, что понижение температуры, рост плотности дислокаций в исходном состоянии и увеличение интенсивности ударного воздействия приводят к повышению роли направленного переноса атомов по сравнению с механизмом случайных блужданий.

Изучение с помощью моделирования показало, что механизм пластической деформации нанокристалла металла, не содержащего дефектов, в условиях одноосного нагружения заключается в

перестройке его кристаллической структуры, не связанной с миграцией атомов на расстояния, больше периода решетки. Типичной особенностью нанокристаллов металлов с кубической решеткой является эффект резкого падения (на 70-90%) напряжения после начала пластической деформации. Процессы пластической деформации с локальным повышением температуры в условиях импульсного воздействия начинаются вблизи границ зерен, субзерен и поверхности раздела, которые могут являться источниками образования междоузельных атомов и пар Френкеля.

В результате моделирования обнаружено, что наличие собственного междоузельного атома вызывает образование области искажения кристалла - кластера, содержащего до 18 атомов, что приводит к уменьшению энергии активации самодиффузии и определяет низкие значения предэкспоненциального множителя. В кристалле с более плотно упакованной ГЦК решеткой число принадлежащих кластеру "активированных" атомов примерно вдвое превышает таковое для ОЦК кристалла. Поэтому, в отличие от вакансионного механизма, для диффузионного перемещения междоузельного атома в кристалле с ГЦК структурой требуется меньшая энергия активации по сравнению с ОЦК. Элементарный диффузионный скачок атома происходит за время, на порядок превышающее период колебаний атомов в металле. При этом максимальная скорость движения атома составляет ~200-400 м/с.

Зона искажений кристалла вокруг собственного междоузельного атома приводит к притягиванию к нему других междоузельных атомов. Это способствует стабилизации дефектов, образовавшихся при рождении пары Френкеля. Поэтому в процессе массопереноса при ударном механическом и взрывном нагружении могут принимать участие не только одиночные междоузельные атомы, но и их более устойчивые скопления. Понижение температуры уменьшает подвижность междоузельных атомов. Вместе с тем, уменьшение температуры при импульсном воздействии повышает напряжения в кристалле. Это способствует росту величины движущей силы, вызывающей направленное перемещение атомов. Результирующее влияние температуры на массоперенос определяется как результат совместного действия этих процессов.

Ключевые слова: диффузия, массоперенос, моделирование, молекулярная динамика, междоузельные атомы, кластер, точечные дефекты, удар, деформация.

ABSTRACT

Filatov A.V. Migration of atoms at shock deformation of ideal metal crystals. – Manuscript.

Thesis for a degree of Doctor of Physical and Mathematical Sciences on specialty 01.04.13 – physics of metals. G.V.Kurdymov Institute for Metal Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2005.

The thesis is dedicated to investigation of main features of mass transfer in metal crystals at mechanical shock deformation and shock wave propagation. Mechanism of diffusion processes at an atomic level and its connection with behavior of crystal lattice were investigated by molecular dynamics simulations and experimental investigations.

Criterion of contribution of different mechanisms in mass transfer was suggested. The concentration profile after mass transfer is given by the equation: $C = C_0 \cdot \exp(-aX^n)$. If n is in the order of 2, the random-jumps' mechanism dominates. In case where $n \sim 1$ corresponds to a directed flux of atoms in conditions of high-energy effects. In this case a mechanism of interstitial movement becomes a possible candidate for explaining the observed apparent diffusivity. A decrease of temperature of an impulse effect as well as an increase of the level of microstresses of the specimen result in an increase of a directed flux of atoms in comparison with the random-jumps' mechanism.

Molecular dynamics simulation shows the interstitial atom in metal causes formation of distortion area in a crystalline lattice – cluster, which involves up to 18 atoms. In crystals with FCC lattice the number of "activated" atoms, belonging to a cluster, more than twice exceeds those for BCC. Such cluster is more mobile in crystals with FCC lattice in comparison with BCC. The low values of pre-exponential factor and activation energy are caused by the mechanism of a cluster migration.

Keywords: diffusion, mass transfer, molecular dynamics simulations, self-interstitial, clusters, point defects, shock, deformation.

Підписано до друку 2005. Формат 60x84/16. Гарн. Тип Таймс. Пап. офс. №1.
Друк різнографічний. Ум. друк. арк. . Ум. фарбо-відб. . Обл.-вид. арк. .
Тираж 100 прим. Зам. №

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України.
Україна, 03680, Київ-142, МСП, бульв. Академіка Вернадського, 36.

Поліграфічна дільниця
Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України.
Україна, 03680, Київ-142, МСП, бульв. Академіка Вернадського, 36.