

548.0:539.186

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ АТОМНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ  
ДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛАХ***В. В. Курсанов, А. Н. Орлов*

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение . . . . .	219
2. Численные методы изучения атомных конфигураций дефектов и их перестроек . . . . .	220
3. Атомные конфигурации и взаимодействие точечных дефектов и их малых скоплений . . . . .	227
а) Конфигурации точечных дефектов (227). б) Рекомбинация пар Френкеля (228). в) Кластеры дефектов (229). г) Конфигурация примесных дефектов (232). д) Взаимодействие примесей с точечными дефектами, конфигурации смешанных кластеров (234). е) Процессы миграции дефектов в кристаллах (238).	
4. Ядра дислокаций и взаимодействия дислокаций с точечными дефектами . . . . .	241
а) ГЦК-кристаллы (242). б) ОЦК-кристаллы (243). в) ГПУ-кристаллы (246). г) Упорядоченные сплавы (250). д) Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами (251). е) Миграция точечных дефектов вдоль дислокации (253).	
5. Границы зерен в поликристаллах . . . . .	254
6. Дефекты в структуре аморфных металлов . . . . .	258
7. Перспективы использования машинного эксперимента для исследования конфигураций дефектов . . . . .	260
Цитированная литература . . . . .	261

## 1. ВВЕДЕНИЕ

После опубликования в УФН предыдущего обзора <sup>1</sup> по моделированию на ЭВМ дефектов в кристаллах прошло свыше семи лет. Получено много новых результатов, и возросла роль машинного моделирования как метода исследования в физике твердого тела. Если первоначально оно использовалось преимущественно при изучении радиационных дефектов (что нашло свое отражение в названии обзора <sup>1</sup>), то теперь в круг объектов исследования входят наряду с различными точечными дефектами и их комплексами также дислокации, границы зерен, аморфные металлы, микротрещины, причем не только в простых одноатомных металлах, но и в переходных металлах, упорядоченных и неупорядоченных сплавах и интерметаллидах.

Заметно возросли быстродействие и объем памяти ЭВМ, что позволяет исследовать сравнительно протяженные дефекты не только в статике, но и изучать динамику их перестроек.

Успехи теории металлов позволили при описании взаимодействия атомов в твердом теле не ограничиваться парными центральными силами, а учитывать более последовательно электронную структуру металла, в частности, ее особенности, связанные с наличием электронов проводимости, а также незамкнутых d-оболочек переходных металлов. «Полудискретная» модель кристалла с дефектом, в которой явный учет атомной структуры проводился только в небольшом объеме («ядре» дефекта), а смещения атомов в окружающей области вычислялись по теории упругости, может быть заменена моделью статичности решетки, в которой при надлежащих условиях периодичности все атомы кристалла описываются дискретно.

Все эти успехи позволили значительно расширить круг объектов и атомных перестроек, исследуемых методами машинного моделирования, выяснить атомные механизмы многих структурно-чувствительных свойств различных кристаллических материалов.

Хотя экспериментальные методы прямого наблюдения структуры дефектов на атомном уровне получили за последние годы заметное развитие (прямое разрешение отдельных атомов в атомном микроскопе и атомных плоскостей и рядов в электронном микроскопе, определение атомных конфигураций точечных дефектов методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей, мёссбауэровская спектроскопия, аннигиляция позитронов и мюонов и др.), многие детали структуры дефектов остаются за пределами разрешения этих методов. К тому же эксперименты такого класса требуют уникального дорогостоящего оборудования. Поэтому машинное моделирование остается незаменимым методом исследования в физике твердого тела. Расширение работ в этом направлении нашло отражение в том, что с 1976 г. регулярно работает Всесоюзный семинар по моделированию на ЭВМ радиационных и других дефектов <sup>2</sup>, проводятся международные конференции <sup>3</sup>. Приближается время, когда постановке любого (особенно дорогостоящего) эксперимента в физике твердого тела будет предшествовать его моделирование на ЭВМ.

Целью настоящей статьи является обобщение новых данных о дефектной структуре кристаллов, полученных со времени написания обзора <sup>1</sup>. Ввиду недостатка места обсуждаются только отдельные типичные работы. При их отборе, естественно, сказались научные интересы авторов. Совсем нерассмотренными остались дефекты в неметаллических кристаллах и применения ЭВМ в квантовой химии, структура поверхности кристалла и процессы роста, структура и механизмы зарождения микротрещин, вопросы кинетики дислокаций, в частности, их прохождение через сетку стопоров. Во всех этих разделах также имеются существенные успехи. Мы старались не повторять содержание ни монографий по дефектам в кристаллах, ни обзора <sup>1</sup>, рассматривая настоящую статью как его продолжение. Популярное введение в предмет содержится в статье <sup>4</sup>.

## 2. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ АТОМНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ ДЕФЕКТОВ И ИХ ПЕРЕСТРОЕК

Первые исследования атомных конфигураций дефектов с помощью «машинного эксперимента» были выполнены Виньярдом с соавторами <sup>5, 6</sup> для меди. В основе используемой ими модели лежал метод молекулярной динамики, предложенный первоначально для изучения атомной структуры жидкостей <sup>7-9</sup> и зарекомендовавший себя позднее как наиболее гибкий метод моделирования конфигураций дефектов и процессов образования, взаимодействия и миграции дефектов.

При построении указанной модели рассматривалась конечная область кристалла («микрорекристаллит») вокруг начального, часто гипотетического положения атомов в ядре дефекта (например, при анализе атомной конфигурации вакансии один из атомов кристалла в начальный момент времени удалялся за его пределы: координатам приписывались значения, близкие к бесконечным). Предполагалось, что атомы в этой конечной области кристалла взаимодействуют посредством парных центральных сил типа, например, Борна — Майера. Связь, вызываемая электронами проводимости металла, имитировалась постоянными направленными внутрь силами на граничных атомах области. Остальной кристалл считался бесконечным и заменялся упругим континуумом, упругие постоянные которого соответствовали заданному металлу. Движение атомов в микрорекристаллите описывалось классическими уравнениями. Для моделирования ответной реакции бесконечной упругой матрицы на границе микрорекристаллита задавались дополнительные граничные силы, упругие и вязкие. Размер микрорекристаллита и его форма

определялись размером и формой моделируемого дефекта. Расчет атомной конфигурации дефекта, как уже указывалось, начинался с задания предполагаемой конфигурации ядра дефекта и заканчивался тогда, когда возмущение, вызванное нетождественностью этой предполагаемой конфигурации и реальной, затухало, а дефект принимал атомную конфигурацию, соответствующую минимуму потенциальной энергии. Большое число атомов в области микрокристаллита (в современных расчетах оно достигает нескольких тысяч) и, следовательно, большое количество связанных уравнений движения делали задачу аналитически неразрешимой. Применение ЭВМ, а следовательно и численных методов, сняло эту трудность.

Система связанных уравнений движения атомов микрокристаллита имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}}_i(t) &= \mathbf{v}_i(t), \quad i=1, 2, 3, \dots, N, \\ \dot{\mathbf{v}}_i(t) &= m^{-1}\mathbf{F}_i[\mathbf{r}_1(t), \dots, \mathbf{r}_N(t); \mathbf{v}_i(t)], \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mathbf{r}_i(t)$  — координата  $i$ -го атома в момент времени  $t$ ;  $\mathbf{v}_i(t)$  — соответствующая скорость;  $N$  — число атомов в микрокристаллите;  $\mathbf{F}_i$  — сила, зависящая от положения всех атомов (в случае граничного атома она зависит и от его скорости);  $m$  — масса атома. Обычно система (1) интегрируется с помощью одного из известных численных методов (обыкновенный метод Эйлера, усовершенствованный метод Эйлера, метод Эйлера — Коши, метод Рунге — Кутты и др.). При выборе метода приходится учитывать размеры микрокристаллита, достаточную точность вычислений, мощность ЭВМ. Более подробное описание моделирующих алгоритмов, выполненных на основе перечисленных принципов, можно найти в <sup>10-15</sup>.

Дальнейшее развитие моделей дефектов, основанных на применении метода молекулярной динамики, пошло по пути усовершенствования межатомных потенциалов (ниже мы более подробно коснемся этой важной темы), учета тепловых колебаний атомов микрокристаллита <sup>13, 16</sup>, введения более сложных граничных условий, особенно для протяженных дефектов (типа дислокаций, границ зерен и др.) <sup>13, 17 \*</sup>.

Необходимость введения тепловых колебаний атомов микрокристаллита была продиктована потребностью в проверке динамической стабильности равновесных атомных конфигураций дефектов, полученных в квазидинамическом режиме при температуре, близкой к температуре абсолютного нуля (по модели Виньярда все атомы микрокристаллита, за исключением атомов ядра дефекта, в начальный момент времени покоились на своих местах в узлах идеальной кристаллической решетки \*\*). Стабильность атомных конфигураций дефектов в современных моделирующих алгоритмах проверяется путем придания случайного вектора скорости (или отклонения от равновесного положения) каждому атому в микрокристаллите. Причем величина, направление этих векторов и такая характеристика, как корреляционная функция, определяются, исходя из заданной температуры кристалла, содержащего изучаемый дефект.

Усовершенствования «сшивки» границ микрокристаллита с остальным бесконечным кристаллом, замененным упругим континуумом, коснулись

\*) Любопытно отметить, что методы, развитые для моделирования атомной структуры дефектов в кристаллах, нашли применение для расчета равновесных конфигураций макроскопических систем, обладающих дискретной периодической структурой. Речь идет о «суперрешетках» вакансионных и газовых пор, наблюдаемых в облученных металлах. В этих суперрешетках встречаются «вакансии» (отсутствие поры в каком-либо «узле») и «дислокации». Вычислив по теории упругости потенциал взаимодействия двух пор как функцию расстояния между ними, можно найти равновесные конфигурации «дефектов» суперрешетки и сравнить их с наблюдаемыми <sup>18</sup>.

\*\*) Правильнее эту ситуацию охарактеризовать как гипотетический случай нулевой температуры, а не истинный, так как отсутствуют и нулевые колебания.

моделей, имитирующих конфигурации дефектов, размеры которых превосходят размеры микрокристаллита (расчетной ячейки).

В этой ситуации микрокристаллит разбивается на две подсистемы: центральную расчетную ячейку из подвижных атомов (область 1), окруженную со всех сторон оболочкой из неподвижных атомов (область 2). Предварительная конфигурация дефекта вводится в виде поля смещения для этого дефекта в кристаллической решетке. Расчет этого поля выполняется с помощью теории упругости. Такое приближенное поле смещений перед началом моделирующего расчета задается как в области 1, так и в области 2 микрокристаллита. С началом моделирующего расчета протяженного дефекта атомы области 2 остаются неподвижными, так как теория упругости дает достаточно точное описание атомных смещений вдали от ядра дефекта, а атомы в области 1 свободно релаксируют из своих первоначальных приближенных положений. В соответствии с действующими межатомными потенциалами и законами ньютоновской механики они занимают такое расположение, которое дает состояние с наименьшей потенциальной энергией.

В ряде задач, особенно при определении атомной конфигурации линейных дефектов, применяется еще более сложная форма микрокристаллита с периодическими граничными условиями<sup>18</sup>. Периодические граничные условия налагаются на две (или четыре) противоположные грани микрокристаллита. Протяженные дефекты типа краевой дислокации или границы зерна располагаются в расчетной ячейке по нормали к граням с периодическими граничными условиями.

Весьма популярная вариационная модель<sup>17, 19</sup> отличается от динамической модели главным образом методом численного расчета стабильных атомных конфигураций дефектов. Точно так же, как в динамической модели, атомы ограниченной области решетки (микрокристаллита) рассматриваются как взаимодействующие друг с другом частицы. Микрокристаллит в вариационной модели чаще всего имеет сферическую форму. Между атомами задается центральное парное взаимодействие  $\varphi^{ij}$ . При этом учитываются соседи ближайших координационных сфер. Микрокристаллит окружен упругой средой, в которой размещены атомы решетки. Смещения упругой среды и находящихся в ней атомов описываются сферически симметричным векторным полем \*)

$$\mathbf{u} = C \frac{\mathbf{r}}{r^3}, \quad (2)$$

где  $C$  — величина, характеризующая мощность дефекта. В такой модели увеличение объема, связанное с наличием дефекта, линейно зависит от  $C$ . Энергия микрокристаллита представляется следующей суммой:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \varphi^{ij} + \sum_i \sum_k \varphi^{ik} + aC + bC^2, \quad (3)$$

где  $\varphi^{ij}$  — потенциал взаимодействия между атомами  $i$  и  $j$ ; суммирование по  $j$  распространяется на все атомы кристаллита, которые взаимодействуют с  $i$ -атомом; суммирование по  $k$  распространяется на все атомы внешней стороны кристаллита.

Член  $aC$  описывает работу против сил, необходимых для удержания совершенной решетки в равновесии, а  $bC^2$  — энергию, запасенную упругим полем.

Энергия для какой-нибудь частной конфигурации находится из разности  $E - E_0$ , где  $E_0$  — энергия совершенной решетки, содержащей такое же число атомов:

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \varphi_0^{ij} + \sum_i \sum_k \varphi_0^{ik}, \quad (4)$$

\*) Выбор именно этого решения уравнения равновесия в изотропной упругой среде для описания  $\mathbf{u}$  детально обсуждался в<sup>27</sup>.

где индекс «0» означает, что данный член вычисляется для бездефектной решетки.

Сила на  $i$ -й атом со стороны атома  $j$  определяется как

$$F^{ij} = \frac{d\varphi^{ij}}{dr^{ij}} \frac{r^{ij}}{r^{ij}}, \quad (5)$$

где  $r^{ij} = r^i - r^j$ . Полная сила на атом  $i$

$$F^i = \frac{dE}{dr^i} = \sum_i F^{ij} + \sum_h F^{ih}. \quad (6)$$

Обобщенная сила, действующая на кристаллит, связанная с упругой переменной  $C$ , находится как

$$F^C = -\frac{dE}{dC} = \sum_i \sum_h F^{ih} \frac{dr^{ih}}{dC} - a - 2bC. \quad (7)$$

Минимумы энергии и перевальные точки определяются следующим образом. Выбирается некоторая исходная конфигурация и задаются начальные векторы положений каждого атома внутри микрокристаллита. Затем каждую координату каждого атома поочередно изменяют, пока компонента соответствующей силы на атом  $i$  не становится равной 0. После этого подбирается величина упругой переменной  $C$ , чтобы обобщенная сила  $F^C = 0$ . После каждого цикла рассчитывается энергия кристаллита. Обычно проводится от 1 до 20 таких итерационных циклов.

Необходимо отметить, что процедура динамической релаксации, применяемая в динамической модели, дает возможность атомам практически сразу принимать конфигурацию с наименьшей энергией. Процедура статической релаксации, применяемая в вариационной модели, позволяет решить, какая конфигурация обладает наименьшей энергией, только вычислив энергии различных возможных метастабильных конфигураций.

Деление кристалла на микрокристаллит, в котором позиции всех атомов находятся из условия минимума энергии, и периферийную зону, где они определяются по теории упругости, обладает тем недостатком, что граничные условия влияют на конфигурацию дефекта, причем тем сильнее, чем меньше микрокристаллит. Ограниченный объем памяти и быстроедействие ЭВМ не позволяют в случае крупных (по атомным масштабам) дефектов полностью исключить влияние граничных условий.

От этого недостатка свободен метод волн статических смещений (ВСС), называемый также методом статики решетки, предложенный Канзаки<sup>20</sup> и Кривоглазом<sup>21</sup>. Он основан на следующих представлениях. В общем случае, когда в кристалле имеются дефекты в виде вакансий, межузельных атомов или примесных атомов в концентрации  $c$ , средние положения атомов образуют правильную кристаллическую решетку, в которой узел с номером  $\gamma$  в ячейке  $s$  имеет радиус-вектор  $R_{s\gamma}$ . В результате флуктуаций концентрации  $\delta c$  атомы испытывают беспорядочные смещения  $u_{s\gamma}$ , так что истинные координаты атома  $s\gamma$  равны  $R_{s\gamma} + u_{s\gamma}$ . Разложим  $u_{s\gamma}$  в ряд Фурье, т. е. представим его в виде суперпозиции амплитуд  $u_{h\gamma}$  ВСС ( $N$  — число узлов в кристалле):

$$u_{s\gamma} = i \sum_k u_{k\gamma} e^{-ikR_{s\gamma}}, \quad u_{k\gamma} = -\frac{i}{N} \sum_{s=1}^N u_{s\gamma} e^{ikR_{s\gamma}}. \quad (8)$$

Распределение дефектов по узлам решетки  $R_{s\gamma}$  характеризуется числами  $c_{s\gamma}$ , равными 1, если в узле  $s\gamma$  находится дефект, и 0, если узел занят регулярным атомом. Можно аналогично (8) вместо  $c_{s\gamma}$  ввести их компоненты Фурье

$$c_{s\gamma} - c = \sum_k c_{k\gamma} e^{-ikR_{s\gamma}}, \quad (9)$$

где  $c_k \gamma$  — амплитуды «волн концентрации» дефектов. Поскольку источниками смещения являются дефекты, положим (индекс  $\gamma$  для простоты в дальнейшем опускаем)

$$u_k = A_k c_k. \quad (10)$$

Амплитуды  $u_k$  определяются из условия равновесия решетки. В макроскопическом приближении они имеют вид

$$\sigma_{ij} n_j = 0, \quad (11)$$

где  $n = k/k$ ,

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial F^0}{\partial u_{ij}} = \lambda_{ijklm} (u_{lm} - L_{lm} \delta c) \quad (12)$$

— компоненты тензора напряжений,  $u_{lm}$  — деформации,  $F^0$  — свободная энергия кристалла,  $\lambda_{ijklm}$  — компоненты тензора модулей упругости среды со средней концентрацией дефектов  $c$ ; слагаемые  $L_{lm} \delta c$  учитывают напряжения, вызванные флуктуациями  $\delta c$  концентрации дефектов. Тогда получим в пределе длинных волн (малые  $k$ )<sup>22</sup>:

$$A_k = \frac{a_k e_k}{k}, \quad (13)$$

где  $e_k$  — некоторый единичный вектор, а  $a_k$  зависит только от направления, но не от величины  $k$ . В простейшем случае изотропного континуума

$$A_k = a_0 \frac{k}{k^2}, \quad a_0 = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)} \frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c}, \quad e_k = n, \quad (14)$$

$a_k = a_0$  и не зависит от  $k$ , а определяется лишь зависимостью объема (или параметра решетки) от  $c$ ;  $\nu$  — коэффициент Пуассона.

В случае малых длин волн флуктуаций соотношение (10) остается в силе, но для определения  $A_k$  необходимо вместо (11) использовать условие равновесия микроскопической теории решеток (аналогично тому, как поступают в теории тепловых колебаний кристаллов). Для этого представим свободную энергию в виде

$$F = F_0 - \sum_{s, s'=1}^N w_{ss'i} (c_{s'} - c) u_{si} + \frac{1}{2} \sum_{s, s'=1} v_{ss'ij} u_{si} u_{s'j}, \quad (15)$$

где  $w_{ss'}$  определяет силу, с которой дефект в узле  $s'$  действует на атом в узле  $s$  («силу Канзаки»), а  $v_{ss'ij}$  — взаимодействие атомов  $s$  и  $s'$ . Из условия равновесия

$$f_{si} = 0 = - \frac{\partial F}{\partial u_{si}} \quad (16)$$

получим систему уравнений

$$Q_{kij} A_{kj} = P_{ki} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (17)$$

для определения коэффициентов  $A_k$ . В (17)

$$Q_{kij} = \sum_{s, s'=1}^N v_{ss'ij} \exp [ik (R_s - R_{s'})], \quad (18)$$

$$P_{ki} = -i \sum_{s, s'=1}^N w_{ss'i} \exp [ik (R_s - R_{s'})]. \quad (19)$$

Если ограничиться учетом взаимодействий  $v_{ss'}$  и  $w_{ss'}$  только в ближайших координационных сферах, число слагаемых в (18) и (19) невелико, и величины  $Q_{kij}$  и  $P_{ki}$  нетрудно определить. Решая систему (17) и используя (13), найдем из (8) смещения всех атомов, не прибегая к искусственному выделению микрокристаллита. В качестве  $c_k$  в (10) следует подставлять значения, соответствующие заданному распределению точечных дефектов. Например, для изолированного дефекта в узле  $R_s = 0$ ,  $c_s = 1$ ,  $c_{s'} = 0$  ( $s \neq s'$ ), так что  $c_k = 1/N$ .

Примеры таких расчетов, выполненных для простых точечных дефектов еще без использования ЭВМ, приведены в <sup>22</sup>. Новые результаты получены в <sup>23</sup>. Метод обобщен на протяженные дефекты (ядро дислокации) <sup>24</sup>.

Как видно, любой из перечисленных методов моделирования дефектов не обходится без использования какого-либо потенциала межатомного взаимодействия  $\phi_{ij}$  (в (15) производные от  $\phi_{ij}$  входят в выражения  $w$  и  $v$ ). Вид зависимости  $\phi_{ij}$  от расстояния  $r_{ij}$  между атомами  $i$  и  $j$  считается известным. Вопросу о возможности представления энергии  $E$  в виде суммы энергий парных взаимодействий (3) и определения вида зависимости  $\phi_{ij}(r_{ij})$  посвящена обширная литература <sup>25-29</sup>, но до недавнего времени использовались только парные центральные потенциалы. Для их определения существуют теоретические методы, основанные на приближенном решении квантовомеханической задачи вычисления энергии кристалла, и эмпирические, в которых  $\phi_{ij}(r_{ij})$  задается в виде полинома, сплайна <sup>30</sup> или иной функции (например, функции Морза  $\phi(r) = D(e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2\alpha e^{-\alpha(r-r_0)})$ , где  $D$ ,  $\alpha$ ,  $r_0$  — константы), и входящие в них константы подбираются так, чтобы вычисленные с помощью функции  $\phi(r)$  значения энергии бездефектного кристалла, констант упругости, постоянной решетки и других характеристик совпадали с измеренными. Эмпирические потенциалы пока более надежны, чем теоретические.

Отметим несколько последних достижений, не отраженных в цитированных обзорах.

Используемые в большинстве работ потенциалы обрезаются обычно между 2-й и 3-й координационными сферами, хотя взаимодействия электронов проводимости проявляются на гораздо больших расстояниях. Эти взаимодействия учитывает теория псевдопотенциала, однако для переходных и благородных металлов она еще слабо развита. Поэтому предпринимались попытки определения формы парного потенциала, не ограниченного условием обрезания, используя экспериментальные данные по фононным спектрам — зависимости частот продольных ( $\omega_l$ ) и поперечных ( $\omega_{l1}$ ,  $\omega_{l2}$ ) колебаний атомов от волнового вектора фонона  $k$ . Восстановление связи между частотами  $\omega(k)$  и производными от энергии парного взаимодействия обсуждается, например, в работе <sup>31</sup>, а значения коэффициентов  $C_{ij}$  в выраже-

нии для потенциала  $E_i(r) = \sum_{j=1}^n c_{ij}(r - r_i)^{j-1}$  между  $(i-1)$ -й и  $i$ -й координационными сферами, определенные по фононным спектрам для 18 кубических металлов, приведены в <sup>32</sup>. Построенные по ним кривые  $E(r)$  заметно отличаются от полученных другими авторами, например <sup>17, 33, 31</sup>, в том числе использовавшими данные по фононным спектрам. Причина расхождений связана как с произвольными допущениями (обрезание потенциала на малых расстояниях), так и с использованием в качестве подгопочных параметров, помимо кривых  $\omega(k)$ , также энергии образования вакансии (что приводит к очень глубокому минимуму потенциала между радиусами первой и второй координационных сфер). Вакансия и другие дефекты с большими градиентами электронной плотности (ядро краевой дислокации, микротрещины, поверхность кристалла) плохо описываются потенциалами, полученными из свойств бездефектного кристалла и пригодными при равномерном распределении средней электронной плотности. Напротив, для описания ядра винтовой дислокации, дефектов упаковки, границ зерен и аморфных металлов такие потенциалы пригодны.

Представление энергии кристалла  $E$  в виде суммы энергий  $E_{ij}$  парных центральных взаимодействий атомов  $i$  и  $j$  является достаточно грубым приближением. Предпринимались попытки его уточнения в направлениях: 1) учета в энергии металла слагаемых, обусловленных электронами проводимости и зависящими от объема кристалла; 2) учета слагаемых, зависящих от взаимных смещений атомов по нормали к прямой, которая их соединяет

4 УФН, т. 142, вып. 2

в равновесной конфигурации, или, иначе говоря, от валентных углов  $\theta$ . Эти слагаемые существенны не только в ковалентных кристаллах, но и в переходных металлах с незаполненными d-оболочками.

Энергия электронов проводимости  $E_e$  в простейшей модели свободных электронов может быть представлена как сумма ряда слагаемых (кулоновской, кинетической, обменной и других энергий), каждое из которых характеризуется своей зависимостью от объема металла  $V = V_0 + \Delta V$  ( $V_0$  — равновесное значение  $V$ ). Если в разложении  $E_e(V)$  сохранить первые не исчезающие слагаемые, то в силу условия равновесия  $\partial E/\partial V = 0$  остается  $E_e(V) = E(V_0) + \alpha \Delta V^2$ . В таком виде Баскс и Мелиус<sup>35</sup> предложили включить  $E_e$  в выражение для полной энергии кристалла

$$E = E_{\Sigma} + C' + \alpha \Delta V^2, \quad (20)$$

где  $E_{\Sigma}$  — сумма энергий  $E_{ij}$  парных взаимодействий, описываемых сплайнами  $\sum_i a_i r^i$ , а  $C'$  и  $\alpha$  — дополнительные константы в потенциале. Используя

экспериментальные данные для параметра решетки, энергии связи, констант упругости, энергии образования и миграции вакансии и других (всего 10) свойств Ni, Ag, Au, Pt, Pd, Cu, Al, авторы определили 10 констант потенциала, включая  $C'$  и  $\alpha$ , и получили удовлетворительное согласие с опытом энергии образования межузельного атома и френкелевской пары, энергии образования и миграции бивакансии и др.

Учет нецентральных сил требует включения в полную энергию кристалла слагаемых, пропорциональных  $\Delta\theta^2$ , где  $\theta$  — отклонение валентного угла от равновесного значения, и проводится, например, в теории решеточной теплоемкости<sup>36</sup>. При моделировании на ЭВМ дефектов в металлах необходимость такого учета обнаружилась лишь недавно при вычислении энергии вакансий и ядра дислокации в переходных металлах с заметным вкладом ковалентных составляющих в балансе сил связи. При этом оказались полезными приемы вычисления энергии связи переходного металла<sup>37,38</sup>. Ее величина определяется в основном вкладом d-электронов и может быть с использованием метода моментов<sup>39,40</sup> представлена в виде

$$\bar{\epsilon}_0 = \int_0^{\epsilon_F} \epsilon n_i^0(\epsilon) d\epsilon = -10 \sqrt{\frac{z}{2\pi}} |\beta| e^{-\epsilon_F^2/2z\beta^2}, \quad (21)$$

где  $z$  — координационное число,  $\epsilon_F^0$  — энергия Ферми,  $n_i^0$  — плотность состояний в d-полосе, которая приближенно представляется гауссовой кривой

$$n_i^0(\epsilon) = (2\pi\mu_{2i})^{-1/2} \exp\left(-\frac{\epsilon^2}{r\mu_{2i}}\right),$$

причем второй момент функции можно выразить формулой<sup>39</sup>

$$\mu_{2i} = \sum_{j=1}^z \beta_{ij}^2, \quad (22)$$

где эффективный резонансный интеграл  $\beta_{ij}$  выражается через двухцентровые интегралы Слэтера<sup>41</sup>  $dd\sigma$ ,  $dd\pi$ ,  $dd\delta$ :

$$\beta_{ij}^2 = \frac{1}{5} [dd\sigma^2(ij) + 2dd\pi^2(ij) + 2dd\delta^2(ij)]. \quad (23)$$

В бездефектном кристалле с межатомным расстоянием  $R$  все  $\beta_{ij}^2$  равны  $\beta^2(R)$ , откуда следует (21). Записывая  $\beta(R)$  в виде  $\beta_0 e^{-qR}$ , добавляя к (21) энергию отталкивания ионных остовов, которую можно представить в виде  $\bar{\epsilon}_R = (1/2) z C_0 e^{-pR}$  ( $C_0$ ,  $p$  — константы), получим энергию связи на атом:

$$E_c = 10 \sqrt{\frac{z}{2\pi}} |\beta| e^{-\epsilon_F^2/2z\beta^2} \left(1 - \frac{q}{p}\right). \quad (24)$$

Если симметричное расположение атомов вблизи дефекта нарушено и атомы смещены на  $u_i$  и  $u_j$ , изменяются все интегралы в (23). Представим



$\beta_{ij}$  в виде  $\beta_{ij} = \beta (1 + \theta_{ij})$ , где

$$\theta_{ij} = 2q \left[ -d_{ij} - \frac{1}{2R} (u_{ij}^2 - d_{ij}^2) + qd_{ij}^2 \right], \quad (25)$$

$u_{ij} = |u_i - u_j|$ ,  $d_{ij} = (u_i - u_j) \times R_{ij}/R$ ;  $R_{ij}$  — расстояние между атомами  $i$  и  $j$  в бездефектном кристалле. Вычисления, которые здесь не воспроизводятся, приводят к формуле для изменения энергии  $i$ -го атома  $\delta\epsilon_i(u_i, u_j)$ , которое зависит только от относительных смещений ближайших соседних атомов. С помощью этого выражения вычислены равновесная конфигурация и энергия вакансии<sup>40</sup> и ядра дислокации<sup>42</sup> в переходном металле.

Хотя современная электронная теория металлов качественно правильно описывает большинство особенностей межатомных взаимодействий даже в сравнительно сложных системах, она еще не позволяет дать достаточно точное и надежное количественное описание этих взаимодействий, чтобы его использовать при машинном моделировании дефектов. Поэтому приходится пока полагаться на эмпирические потенциалы (не обязательно центральные пары), учитывающие по возможности представляющие интерес эффекты, например, методами<sup>35, 39</sup>.

Заметим, что недавно вычислена энергия образования некоторых точечных дефектов в благородных металлах с помощью потенциала, учитывающего трехчастичные взаимодействия<sup>158</sup>.

### 3. АТОМНЫЕ КОНФИГУРАЦИИ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ И ИХ МАЛЫХ СКОПЛЕНИЙ

#### а) Конфигурации точечных дефектов

Простейшими точечными дефектами являются вакансии (пустой узел в кристаллической решетке), межузельный атом (собственный атом кристалла, расположенный в межузельном пространстве), примесь замещения и примесь внедрения.

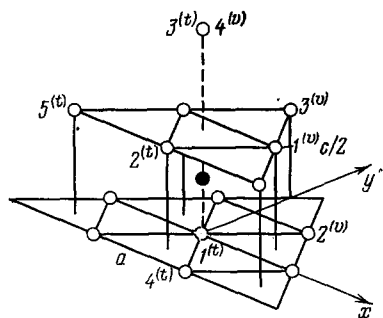


Рис. 1. Вакансия (штриховой кружок) и тригональный межузельный атом (темный кружок) в ГПУ-металле (магнии)<sup>44</sup>.  $n(v)$  —  $n$ -й сосед вакансии,  $n(t)$  —  $n$ -й сосед межузельного атома.

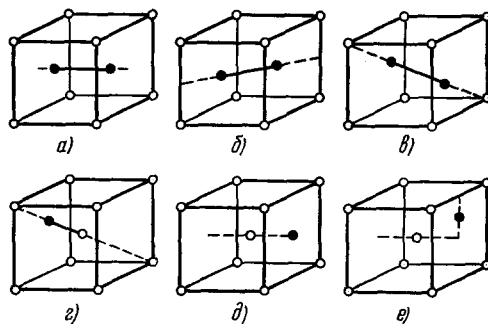


Рис. 2. Шесть конфигураций межузельного атома в  $\alpha$ -железе<sup>17</sup>.

а)  $I_1$  —  $\langle 100 \rangle$ -гантель; б)  $I_2$  —  $\langle 101 \rangle$ -гантель; в)  $I_3$  — краудион; г)  $I_4$  — смещенный краудион; д)  $I_5$  — октаэдрический межузельный атом; е)  $I_6$  — тетраэдрический межузельный атом<sup>17</sup>.

Методом машинного моделирования была получена новая информация об атомной структуре этих дефектов, в ряде случаев заставившая пересмотреть сложившиеся представления. Так, было обнаружено специфическое поле смещений атомов вокруг вакансий в кубических металлах. Как и предсказывалось теорией упругости, первые соседи смещались в сторону вакантного узла на расстояния, составляющие несколько процентов от постоянной решетки. Например, в меди эти смещения составляют 1,5—3,2% (разброс за счет разных потенциалов межатомного взаимодействия). Вторые соседи

Таблица I  
Межузельные конфигурации в  $\alpha$ -железе  
( $\Omega$  — атомный объем)<sup>17</sup>

Конфигурация (см. рис. 2)	Разница в энергии образования данной конфигурации и конфигурации $I_2$ , эВ	Увеличение объема кристалла $\Delta V$ ( $\Omega$ )
$I_1$	1,29	1,7
$I_2$	0	1,6
$I_3$	0,32	1,7
$I_4$	0,36	1,7
$I_5$	1,12	1,4
$I_6$	0,85	1,5
$I_7$	0,33	1,7

Для межузельного атома энергетически наиболее выгодной конфигурацией оказалась «гантель», вытянутая в ГЦК-металле вдоль направления  $\langle 100 \rangle$ <sup>5</sup>, а в ОЦК-металле — вдоль  $\langle 110 \rangle$ <sup>43, 17</sup> (рис. 2, б, табл. I). В ГПУ-металлах наиболее устойчивым оказалось тригональное внедрение, хотя была обнаружена и менее стабильная октаэдрическая конфигурация (см. рис. 1).

В настоящее время гантельная конфигурация межузельных атомов получила множество экспериментальных подтверждений и никаких сомнений не вызывает<sup>45</sup>. В то же время переход краудина в гантель является предметом дискуссий<sup>46, 47</sup>.

#### б) Р е к о м б и н а ц и я п а р Ф р е н к е л я

Метод молекулярной динамики позволил проследить атомные перестройки при реакциях между точечными дефектами. Наибольший интерес здесь представляла реакция рекомбинации пары Френкеля. Зная атомные конфигурации вакансии и межузельного атома, можно было, помещая их на различные расстояния друг от друга, определить то критическое расстояние между ними, когда начинается процесс их спонтанного сближения и рекомбинации. В первой работе<sup>5</sup> по изучению зоны спонтанной рекомбинации в ГЦК-кристалле меди было установлено, что в плоскости  $\{100\}$  зона рекомбинации вокруг межузельной гантели вытянута вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  и содержит 16 нестабильных узлов, при попадании в которые вакансии происходит ее спонтанная рекомбинация с межузельным атомом. Более полное определение зоны рекомбинации в меди в трех измерениях выполнили Шольц и Леманн<sup>48</sup> и Дриттлер с сотрудниками<sup>49</sup>. Используя разные потенциалы, эти две группы получили близкие количества нестабильных узлов (74 и 62 соответственно).

Рядом авторов всесторонне исследовалась зона рекомбинации пар Френкеля в ОЦК кристаллах<sup>43, 50, 51</sup>. Здесь также были отмечены ее сильная анизотропия и относительно небольшие размеры (несколько десятков атомов). Было показано, что процесс аннигиляции идет двояко. На расстоянии первых соседей межузельный атом непосредственно заполняет вакансию. На больших расстояниях в вакансию попадает ее ближайший сосед, а не исходный межузельный атом, движение которого к вакансии стимулирует прохождение небольшой цепочки атомных замещений.

Заметное влияние решеточной симметрии на зону рекомбинации было обнаружено и в ГПУ-металле (магний)<sup>52</sup>, где выделяются плотноупакованные направления  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ,  $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ , которые создают каналы для рекомбинации. Всего при анализе реакции межузельного атома, находящегося в наиболее стабильной тригональной конфигурации, с вакансией было обнаружено 49 узлов, при попадании в которые вакансия рекомбинировала (рис. 3).

сместились не к вакансии, как ожидалось, а от нее, хотя и на меньшие расстояния, чем первые<sup>5</sup>. Такая аномальная релаксация определяется полностью геометрией кристаллической решетки. В отличие от изотропного упругого континуума, в ГЦК-решетке ближайшие соседи, смещаясь к вакансии, выталкивают вторых соседей от нее. Похожая картина смещений была отмечена и в ОЦК-металле ( $\alpha$ -железе)<sup>43, 11</sup>. В ГПУ-металле (магний) также была отмечена зависимость направления и величины атомных смещений от геометрии решетки<sup>44</sup> (рис. 1).

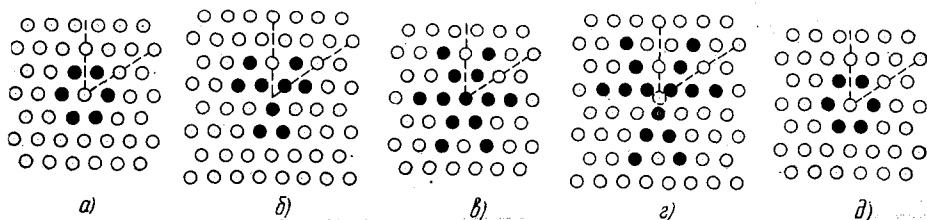


Рис. 3. Зона рекомбинации пары Френкеля в ГПУ-решетке магния <sup>52</sup>.

Черными кружками обозначены нестабильные положения вакансий. Приведены пять разных (0001)-плоскостей, расположенных на разных расстояниях до тригонального внедрения: а) 2,2а; б) 1,4а; в) 0,6а; г) 0,2а; д) 1,0а. Межузельный атом находится между плоскостями в) и г), его проекция на плоскости г) показана светлым кружком.

Размер и форма зоны спонтанной рекомбинации пар Френкеля реагируют на внешнее нагружение. В частности, всестороннее сжатие приводит к ее увеличению <sup>51</sup>. В условиях одноосного сжатия вдоль различных кристаллографических направлений зона рекомбинации также растет <sup>53</sup>, но в основном перпендикулярно к направлению сжатия.

### в) Кластеры дефектов

Машинное моделирование позволило провести систематическое изучение атомных конфигураций кластеров вакансий и межузельных атомов в зависимости от числа *n* содержащихся в кластере дефектов. Оказалось, что число *n* нельзя считать исчерпывающей характеристикой кластера. Кластеры с одинаковым *n* могут отличаться атомной конфигурацией. Так, например, в ГЦК-решетке кластер из двух межузельных атомов <sup>54</sup> обладает как минимум тремя устойчивыми \*) атомными конфигурациями (рис. 4). Приходящаяся на один атом энергия межузельных кластеров  $E_{ni}^f/n$  в меди при малых *n* меньше для компактных равноосных кластеров, а при *n* > 9 — для плоских <sup>55</sup>. Вакансионные кластеры не являются исключением из этого правила (рис. 5). Например, бивакансия в кубических кристаллах обладает целым рядом устойчивых конфигураций. Расчет конфигураций бивакансии в α-Fe динамическим методом с потенциалом Эргинсоя и др. <sup>43</sup> дает следующие значения энергии связи для двух вакансий, расположенных на расстоянии первых, вторых и третьих соседей: 0,209 эВ, 0,47 эВ, 0,097 эВ соответственно <sup>56</sup>.

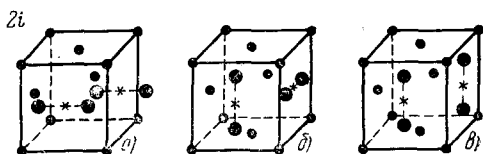


Рис. 4. Различные атомные конфигурации пары межузельных атомов в ГЦК-кристалле меди, различающиеся энергиями связи <sup>54</sup>.

а)  $E_{2i}^B = 0,36$  эВ; б)  $E_{2i}^B = 40$  эВ; в)  $E_{2i}^B = 49$  эВ.

С увеличением числа дефектов в кластере растет и разнообразие его атомных конфигураций. Определение кластера как группы взаимодействующих дефектов мало способствует сокращению этого разнообразия, так как, например, пара вакансий взаимодействует даже на расстоянии далее десяти

\*) Под устойчивой конфигурацией кластера понимается его атомная конфигурация, обладающая положительной энергией связи:

$$E_{ni}^B = nE_i^f - E_{ni}^f,$$

где *n* — число элементарных дефектов в кластере типа *i*;  $E_i^f$  — энергия образования единичного дефекта типа *i*;  $E_{ni}^f$  — энергия образования кластеров из *n* атомов.

тых соседей, а любой крупный вакансионный кластер можно условно разбить на такие пары. Чтобы ограничить множество возможных конфигураций, обычно рассматривают только наиболее устойчивые кластеры (с максимальной энергией связи).

Для их отбора определяют энергию связи пары дефектов как функцию расстояния между ними. Такой расчет <sup>57</sup> для бивакансии в  $\alpha$ -Fe (потенциал межатомного взаимодействия Джонсона <sup>17</sup>) показал, что энергии связи для

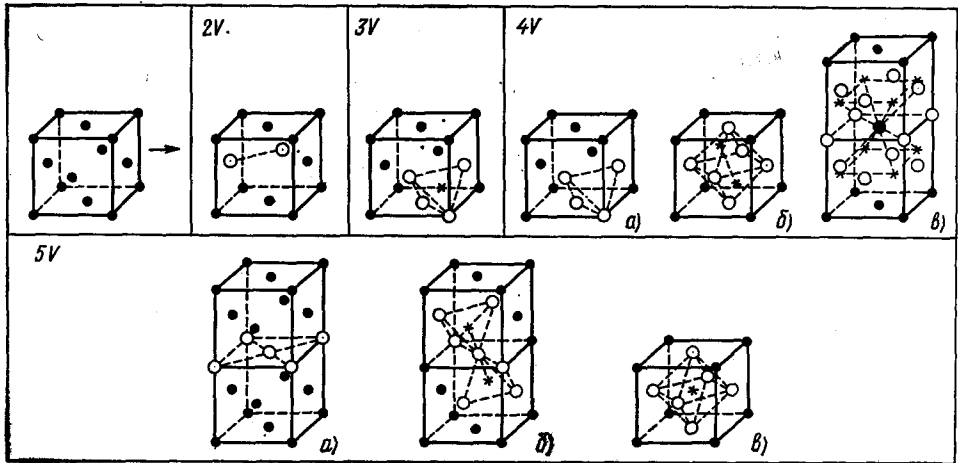


Рис. 5. Конфигурации вакансионных кластеров в гранцентрированной кубической решетке <sup>54</sup>.

Звездочкой обозначены атомы, претерпевшие в процессе образования устойчивой конфигурации сильное смещение. Энергии связи тетравакансий: а) 0,1 эВ (конфигурация неустойчивая), б) 0,6 эВ, в) 0,7 эВ; пентавакансий: а) 0,7 эВ, б) 0,9 эВ, в) 1,5 эВ.

расстояний, больших расстояния между десятymi соседями ( $d > d_{10}$ ), меньше 0,01 эВ. Поэтому достаточно хорошим приближением является ограничение области взаимодействия для пары вакансий десятymi соседями при условии, что температура кристалла находится в пределах  $T \geq 120 \text{ K}$  ( $kT \geq 0,01 \text{ эВ}$ ). При более высоких температурах область взаимодействия двух вакансий еще меньше. Если учесть, что вакансии мигрируют в  $\alpha$ -Fe лишь при температурах выше 250 °C (523 K), то при рассмотрении диффузии вакансий и их объединения в кластеры можно считать, что область взаимодействия ограничена приблизительно шестью соседями (табл. II) <sup>57</sup>.

Таблица II

Область взаимодействия вакансии — вакансия в  $\alpha$ -железе <sup>57</sup>

Расстояние между вакансиями (номер соседства)	Число атомных мест в области взаимодействия вокруг одной из вакансий	Энергия взаимодействия
$d \leq d_9$	136	$\geq 0,01 \text{ эВ}$ ( $T = 120 \text{ K}$ )
$d \leq d_6$	64	$\geq 0,025 \text{ эВ}$ ( $T = 290 \text{ K}$ )
$d \leq d_4$	50	$\geq 0,05 \text{ эВ}$ ( $T = 570 \text{ K}$ )

прослежены только наиболее общие тенденции эволюции атомных конфигураций кластеров в зависимости от числа дефектов  $n$ .

В кристаллах с ОЦК-решеткой (на примере  $\alpha$ -железа) изучены вакансионные кластеры, содержащие до 38 вакансий <sup>57</sup>. Расчеты производились для линейных, плоских и компактных (трехмерных) кластеров, состоящих

Даже при введении такого рода ограничений разнообразие кластеров все же остается значительным. Чтобы проанализировать и классифицировать их атомные конфигурации, привлечение «машинного эксперимента» становится неизбежным. Но и при широком его использовании на настоящем этапе

из одинакового числа вакансий. Было установлено, что кластерной формой с наибольшей энергией связи, приходящейся на одну вакансию, всегда была компактная форма. Ступени роста и отдельные конфигурации таких кластеров приведены на рис. 6.

Энергия связи двухслойных пластинок из вакансий  $\{110\}$  приближается к значению  $E_{nV}^B$  компактных кластеров с тем же числом вакансий (рис. 7).

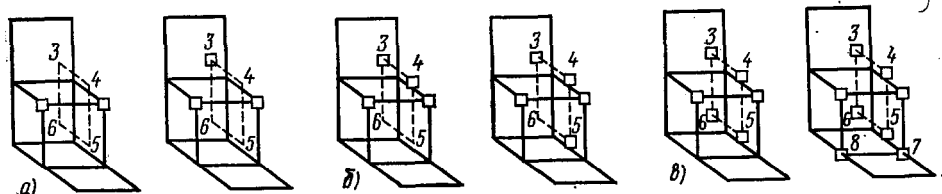


Рис. 6. Ступени роста наиболее стабильных конфигураций вакансионных кластеров в  $\alpha$ -железе <sup>57</sup>.

a) Рост  $V_3$ ; б) рост  $V_4$ ; в) рост  $V_5$ . Квадратиками обозначены узлы, занятые вакансиями.

Энергии связи двойных слоев вакансий  $\{100\}$  и линейных вакансионных цепочек примерно на 20% ниже энергий связи компактных кластеров с тем же числом вакансий. Наименьшей энергией связи обладают вакансионные монослои. Для всех форм вакансионных кластеров в  $\alpha$ -Fe энергию связи можно выразить формулой <sup>57</sup>

$$E_{nV}^B = \alpha n - \beta \quad (n \geq 10), \quad (26)$$

коэффициенты  $\alpha$  и  $\beta$  приведены в табл. III.

Если плоские вакансионные скопления с увеличением количества составляющих вакансий стремятся к преобразованию в дислокационные петли <sup>57, 59, 60</sup>, по крайней мере в ГЦК-кристаллах, то увеличение в размерах наиболее устойчивых компактных вакансионных кластеров ведет к их преобразованию в небольшие вакансионные поры. Так, октаэдрический вакансионный кластер  $V_6$  в  $\alpha$ -Fe (см. рис. 6) уже можно рассматривать как зародыш поры <sup>58</sup>. Этот вывод подкрепляется расчетом энергии активации диссоциации кластера \*)  $V_6$  на компактный кластер  $V_5$  и вакансию, которая равна 1,46 эВ и значительно превышает энергию диссоциации меньших кластеров. Следующей октаэдрической порой является компактный кластер, состоящий из 19 вакансий.

Разнообразие форм вакансионных кластеров, предсказанных в «машинном эксперименте», в настоящее время фиксируется прямыми методами наблюдения (в основном, электронной микроскопией) в облученных металлах. Отмечено, что иррегулярные формы вакансионных кластеров, дислокационные петли вакансионного типа образуются ударным путем в каскадах атом-атомных соударений <sup>61, 62</sup>, а вакансионные поры — обычно в процессе отжига <sup>63</sup>.

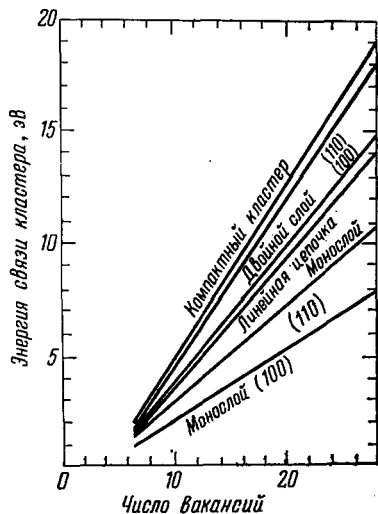


Рис. 7. Энергии связи наиболее стабильных форм вакансионных кластеров в  $\alpha$ -железе как функция числа вакансий в кластере <sup>58</sup>.

\*) Под энергией активации диссоциации кластера понимается сумма энергии связи единичной вакансии и кластера и энергии миграции вакансии <sup>57</sup>.

Важным вопросом, на который в последнее время пытаются дать ответ машинное моделирование дефектов, является выявление путей перехода менее устойчивых кластерных форм в более устойчивые. Так, было установлено, что в ГЦК-кристалле вакансионной петле энергетически более выгодно присоединять вакансии в своей плоскости, чем в прилегающих к ней плоскостях около ее центра <sup>60,64</sup>, что привело бы к перестройке петли в пору.

Учитывая вышесказанное и меньшую энергию диссоциации плоского скопления по сравнению с компактным кластером, следует предположить, что путь перестройки плоских скоплений в наиболее устойчивые компактные лежит через растворение вакансионных пластинок. Высказана также гипотеза о динамической перестройке плоских скоплений вакансий в объемные

Таблица III

Коэффициенты  $\alpha$  и  $\beta$  в выражении для энергии связи гагансионных кластеров в  $\alpha$ -железе ( $E_{nV}^B = \alpha n - \beta$ )<sup>57</sup>

Тип кластера	$\alpha$ , эВ	$\beta$ , эВ
Компактный	0,79	2,85
{110}-двойной слой	0,77	3,05
{100}-двойной слой	0,62	2,30
Линейные цепочки	0,6	—
{110}-монослой	0,43	1,30
{100}-монослой	0,32	1,10

кластеры <sup>65</sup>, когда вблизи плоского скопления вакансий пройдет каскад атом-атомных соударений и оставит после себя небольшое дополнительное скопление вакансий, которое приведет к перестройке плоского скопления в объемный кластер.

Анализ структур межузельных кластеров не выявил такого многообразия структур, как для вакансионных кластеров. Баллоу и Перрен <sup>66</sup>, используя динамическую модель, проследили эволюцию атомной конфигурации кластера из межузельных атомов (кратко, внедрений) в  $\alpha$ -желе-

зе. Было установлено, что наиболее устойчивая конфигурация трех внедрений — три параллельные гантели  $\langle 110 \rangle$  в плоскости  $\{110\}$ . В этой же плоскости продолжается рост зародыша призматической петли при добавлении следующих межузельных атомов. Добавление лишнего слоя атомов нарушает правильное для плоскостей  $\{110\}$  в ОЦК-решетке чередование атомных слоев . . . АВАВ . . . , внося в него дефект упаковки . . . АВААВАВ . . . Его можно устранить путем взаимного сдвига слоев атомов АА, составленных из гантелей, на вектор  $\frac{1}{2}[001]$  параллельно плоскости слоя. При этом призматическая дислокация с вектором Бюргерса  $\frac{1}{2}[110]$ , ограничивающая плоское скопление внедренных атомов, превращается в скользящую петлю с вектором Бюргерса  $\frac{1}{2}[110] + \frac{1}{2}[00\bar{1}] = \frac{1}{2}[11\bar{1}]$ . Эта петля может еще понизить свою энергию путем поворота из плоскости (110) в плоскость (111), становясь вновь чисто призматической, но скользящей в плоскостях призмы (110). Такая перестройка наступала (при гибких граничных условиях), когда число межузельных атомов в скоплении достигало 16. Призматические петли с вектором Бюргерса  $\frac{1}{2}(11\bar{1})$  наблюдались в облученных ОЦК-металлах <sup>67,68</sup>.

(г) К о н ф и г у р а ц и я п р и м е с н ы х д е ф е к т о в

Примесные атомы замещения и внедрения представляют собой точечные дефекты. Их атомные конфигурации определяют свойства твердого раствора. Нерастворимые примеси возникают при ионной имплантации и под действием быстрых частиц, вызывающих ядерные реакции. Образующиеся при этом трансмутанты, в частности гелий, изменяют свойства облучаемого материала, что стимулировало работы по моделированию их атомных конфигураций на ЭВМ.

Было установлено, что примеси замещения создают вокруг себя анизотропные поля смещений атомов. Так, поле смещений вокруг гелия в положении замещения в ГЦК кристалле меди <sup>69</sup> напоминает поле смещений вокруг вакансии: первые соседи смещаются по направлению к гелию, вторые — от

него. По величине смещения вокруг гелия значительно меньше, чем вокруг вакансии (см. рис. 2 в <sup>69</sup>).

Примесный атом замещения не обязательно располагается в вакантном узле. Так, атом углерода в  $\alpha$ -железе не остается в центре вакансии, а уходит из него по одному из шести эквивалентных направлений  $\langle 100 \rangle$ . Конфигурация углерода замещения в  $\alpha$ -Fe представлена на рис. 65, в в <sup>27</sup>.

Большинство стабильных конфигураций примесей внедрения представляют собой смешанные гантели (рис. 8). Они наблюдаются и экспериментально, например, с помощью эффекта Мёссбауэра <sup>70</sup>. Смешанная гантель

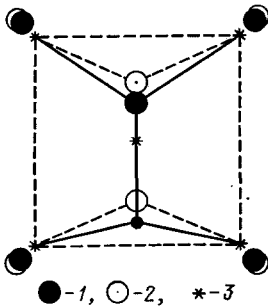


Рис. 8. Структура смешанной гантели в ГЦК-металле <sup>71</sup>.

Потенциал Морза,  $r_0/R = -0,06$ . 1 — атомные позиции для смешанной гантели; 2 — атомные позиции для «идеальной» гантели (собственное межузлие); 3 — позиции атомов в идеальной решетке.

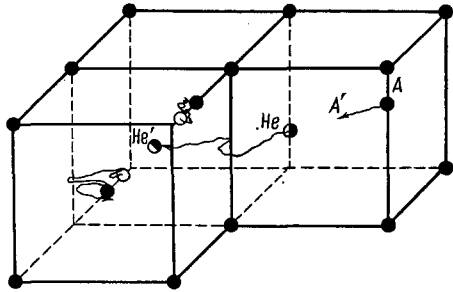


Рис. 9. Развал смешанной гантели Fe — He  $[110]$  в  $\alpha$ -железе <sup>72</sup>.

A, He — исходные положения атомов; A', He' — положения атомов после релаксации. Новое положение He — в центре грани  $\langle 100 \rangle$ .

имеет разные плечи (расстояния от узла решетки до атома примеси и атома матрицы). Соотношение их длин  $\zeta$  зависит от вида примеси и от вида кристалла матрицы. Зависимость  $\zeta$  от вида примеси исследовали Дедерихс с соавторами <sup>71</sup>. Они искусственно задавали примесный атом, сдвигая потенциал взаимодействия (потенциал Морза) атомов матрицы на определенную величину  $r_0$  и тем самым формируя новый потенциал примесь — атом матрицы \*). Отрицательные значения  $r_0$  имитировали примеси малых размеров, положительные  $r_0$  — крупные примеси. Было установлено, что устойчивая смешанная гантель образуется не во всех случаях, а преимущественно тогда, когда радиус примеси меньше радиуса атома матрицы ( $r_0 < 0$ ). Для больших отрицательных значений ( $|r_0/R| \geq 0,06$ , где  $R$  — расстояние, соответствующее минимуму исходного потенциала Морза) смешанная гантель нестабильна. Для  $r_0/R > 0,03$  смешанная гантель также теряет стабильность.

В рамках динамической модели была проверена стабильность смешанной гантели в ОЦК-решетке железа, когда одно из ее плеч занимал гелий <sup>72</sup>. Такая гантель оказывалась нестабильной (рис. 9). Собственное внедрение возвращалось в свой узел, а гелий образовывал конфигурацию, напоминающую статический крауддион и уже предсказанную Уилсоном и Джонсоном <sup>73</sup>. Эту конфигурацию можно рассматривать как предельный случай гантели (ср. с рис. 8). Результаты расчетов энергий образования различных конфигураций гелия внедрения в ГЦК- и ОЦК-металлах, атомных смещений и энергий миграции приведены в табл. IV и V. Самые низкие энергии образования

\*) Параллельный оси  $r$  сдвиг кривой потенциала Морза из положения, описывающего взаимодействие атомов матрицы, на величину  $r_0$  для имитации потенциала взаимодействия примеси с атомами матрицы носит искусственный характер и может быть использован только в целях приближенной оценки.

Таблица IV

Энергии образования (эВ) гелия внедрения в ГЦК-металлах. Энергии активации перемещения даны в последней колонке. Числа в скобках — смещения ближайших соседей в единицах половины постоянной решетки <sup>73</sup>

Металл	Координаты атома гелия			Энергия активации перемещения гелия внедрения, эВ
	(1, 0, 0)	(1/2, 1/2, 0)	(1/2, 1/2, 1/2)	
Ni	4,60 (-0,124)	4,52 (-0,246)	5,39 (-0,092)	0,08
Cu	2,03 (-0,069)	2,60 (-0,215)	2,96 (-0,074)	0,57
Pd	3,68 (-0,074)	5,42 (-0,182)	5,43 (-0,062)	1,74
Ag	1,53 (-0,052)	2,39 (-0,200)	2,60 (-0,058)	0,86

Таблица V

Энергии образования (эВ) гелия внедрения в ОЦК-металлах. В последней строке приведены энергии активации перемещения внедренного гелия (эВ) <sup>73</sup>

Координаты атома гелия	Ванадий	Железо	Молибден	Тантал	Вольфрам
1,0,1	4,61	5,36	4,91	4,23	5,47
0,5,0,1	4,74	5,53	5,14	4,22	5,71
0,0,1	4,61	5,36	4,91	4,23	5,47
0,75; 0,25; 1	4,90	5,76	5,55	4,60	6,19
0,5; 0,5; 1	5,38	6,28	6,52	5,04	7,35
0,25; 0,75; 1	4,90	5,76	5,55	4,60	6,19
0,75; 0,25; 0,75	5,02	5,80	5,67	4,62	6,32
0,50; 0,50; 0,50	5,18	6,16	6,56	5,15	7,44
0,25; 0,75; 0,25	5,02	5,79	5,66	4,61	6,32
Энергия активации перемещения внедренного гелия (эВ)	0,13	0,17	0,23	0,01	0,24

гелия найдены для конфигурации (1, 0, 0), которая выше была названа предельным случаем смешанной гантели. Исключение составляет Ni, для которого конфигурация (1/2, 1/2, 0) энергетически более выгодна. Энергия образования гелия в конфигурациях (1, 0, 1) и (0, 0, 1) одинакова во всех изученных ОЦК-металлах. Энергии образования конфигураций гелия в ОЦК-металлах довольно велики, что согласуется с низкой растворимостью гелия в этих металлах. Энергия активации перемещения  $E^m$  определена, исходя из предположения, что седловая точка находится в (1/2, 0, 1).  $E^m$  в ОЦК-металлах ниже, чем в ГЦК-металлах.

д) Взаимодействие примесей  
с точечными дефектами,  
конфигурации смешанных кластеров

Во втором разделе уже говорилось о том, что машинный эксперимент позволяет не только находить равновесные атомные конфигурации, но и «наблюдать» за прохождением реакций между дефектами. Простейший пример таких реакций (рекомбинация пар Френкеля) уже приводился выше. Взаимодействие примесей с точечными дефектами представляет другое поле применения машинного моделирования.

Следовало ожидать, что примесь внедрения, так же как собственный межузельный атом, будет спонтанно рекомбинировать с вакансией и с вакан



сионными кластерами, вызывая их перестройку. Проверка этого предположения была произведена с помощью динамического метода на примере реакций межузельного гелия с вакансией<sup>74</sup> и с бивакансиями<sup>56</sup> в кристалле  $\alpha$ -железа. Бивакансии состояли из двух вакансий в узлах решетки на расстоянии первых, вторых и третьих соседей. Для вакансии и каждой бивакансии определена зона спонтанного взаимодействия комплекса ( $He + V, 2V$ ). Вокруг вакансии имеется зона из 42 узлов, попадая в которые межузельный гелий рекомбинирует с ней и переходит в положение замещения. Сравнение с результатами, полученными для бивакансий, показывает, что ни одна из рассчитанных для них зон не является простой суммой зон рекомбинации межузельного гелия с единичной вакансией. Для бивакансий зоны рекомбинации всегда меньше (63, 69 и 71 узел) суммарной зоны для двух изолированных вакансий (84 узла). Как видно, чем плотнее бивакансия (выше ее энергия связи), тем меньше ее зона спонтанной рекомбинации с межузельной примесью. Наиболее стабильной бивакансии  $\langle 100 \rangle$  соответствует наименьшая зона рекомбинации из 63 нестабильных положений атома He. Расчеты<sup>75</sup> для никеля показали, что 5 атомов He вытесняют один атом матрицы из своего узла и располагаются в образовавшейся вакансии. 8 атомов He вытесняют два атома Ni. Это образование можно рассматривать как зародыш гелиевого пузырька.

Динамический метод моделирования, когда в процессе машинного эксперимента определяются траектории всех атомов, участвующих в реакции, позволил выявить три типа взаимодействия межузельного гелия с вакансией и бивакансией. В вакансии, расположенные в ближайших к гелию узлах, гелий переходит непосредственно, совершив одно перемещение (реакция типа I). В вакансии, расположенные в более отдаленных узлах, гелий вообще не попадает. Он замещает один из ближайших атомов железа, а тот идет в вакантный узел (реакция типа II).

Таблица VI

Характеристики реакций межузельного гелия с различными бивакансиями<sup>56</sup>

Тип бивакансии	$E_{2V}^B$ , эВ	$E_{2V}^B$ , эВ <sup>17</sup>	Размер зоны спонтанной рекомбинации	Тип реакции	$E_{He+2V}^B$ , эВ
Составляющие вакансии на расстоянии первых соседей	0,21	0,13	69	II III IV	4,57—3,23 4,58—2,72 —0,01
Составляющие вакансии на расстоянии вторых соседей	0,47	0,20	63	I II IV	4,48—4,18 3,12—2,23 —0,04
Составляющие вакансии на расстоянии третьих соседей	0,10	—	71	I II IV	3,75—1,93 3,59—2,48 —0,06

Эти два типа реакций повторяются и для бивакансий (табл. VI). Специфической реакцией рекомбинации межузельного гелия с бивакансиями является реакция III типа. Она была обнаружена только при взаимодействии гелия с бивакансией, составляющие вакансии которой расположены в узлах на расстоянии первых соседей, и характеризуются тем, что межузельный гелий переходит в положение замещения, побывав в обеих вакансиях (рис. 10). Атом гелия (двухцветный кружок) первоначально направляется в вакансию 1, после попадания в которую он совершает ряд значительных колеба-

ний. В процессе этих колебаний гелий переходит в вакансию 2, вновь возвращается в вакансию 1 и, наконец, останавливается в вакансии 2, перейдя в положение замещающей примеси.

Для всех рассмотренных реакций бивакансий с межузельным гелием были вычислены энергии связи комплексов ( $\text{He} + 2V$ ), образующихся после прохождения реакции рекомбинации. Результаты представлены в табл. VI, где комплексы, находясь в которых гелий не рекомбинировал с бивакансиями (находился за пределами зоны спонтанной рекомбинации), условно обозначены как реакции типа IV. Из таблицы можно заключить, что для всех комплексов, образовавшихся после рекомбинации, энергия связи достаточно велика ( $1,93 - 4,57$  эВ), а комплексы, где гелий остается вне зоны рекомбинации, обладает низкой или отрицательной энергией связи ( $-0,010 - 0,059$  эВ).

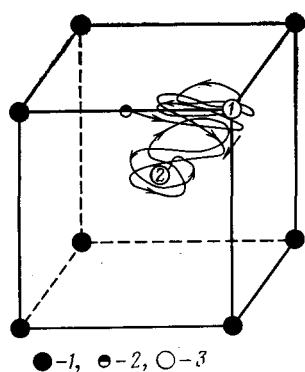


Рис. 10. Траектория движения атомов при взаимодействии межузельного гелия с бивакансией (реакция типа III)<sup>56</sup>. 1 — атом матрицы, 2 — атом гелия, 3 — вакансия.

на месте первого или второго соседа по отношению к примесному атому. Энергии связи последних комплексов были оценены Дедерихсом с соавторами<sup>71</sup>. Эти расчеты подтвердили возможность образования подобных кластеров и выявили ограничение на их стабильность, связанное с относительным размером примеси.

Моделирование непосредственно самого хода реакции захвата собственного межузельного атома примесью замещения (гелий) было выполнено для ОЦК-железа<sup>72</sup>. Для анализа взаимодействия гантельного внедрения с атомом гелия в положении замещения гелий последовательно помещался в различные положения по отношению к центру гантельного внедрения. В процессе динамического расчета по мере приближения энергии микрокристаллита к минимуму устанавливалась стабильная конфигурация кластера ( $\text{He} + i$ ). Так, при попадании гелия в узел первого соседа по отношению к центру гантели, один из ее атомов притягивается к атому гелия. Гелий при этом покидает свое место и уходит в положение внедрения, занимая середину ребра куба (эта конфигурация описана в предыдущем разделе). Межузельный атом железа занимает узел, где был расположен гелий.

Все комплексы гантель — гелий в узле первого соседа оказались нестабильными. Более сложным образом повели себя комплексы гантель — гелий в узле второго соседа по отношению к центру гантели. Захват происходит только в тех случаях, когда один из атомов гантели и атом гелия располагаются на расстоянии меньшем постоянной решетки. Таких положений вторых соседей четыре из шести. Здесь проявляется зависимость структуры зоны захвата от направления залегания гантельного внедрения, которая затем подтвердилась и на соседях более высокого порядка. Захват, как и в случае первых соседей, происходит посредством притяжения одного из атомов гантели к гелию, который выталкивается со своего места и переходит из положения замещения в положение внедрения.

Ряд экспериментальных исследований<sup>76-77</sup> указывает на наличие взаимодействия собственных внедрений с атомами примесей. В частности, предполагается, что в кубических металлах захват собственного межузельного атома примесью приводит к образованию смешанных гантелей, о которых говорилось в предыдущем разделе. Не исключаются и другие конфигурации комплексов примесь — собственный межузельный атом<sup>78</sup>.

По предположению Джонсона и Лэма<sup>79</sup> связь между примесью (замещения) и собственным межузельным атомом в ГЦК-металлах образуется тогда, когда примесь занимает один конец гантели или когда гантель располагается

При попадании межузельного атома в узлы, расположенные на расстояниях третьих и более далеких соседей атома гелия, захват происходит только вдоль плотноупакованных направлений, причем только вдоль тех из них, которые лежат в плоскости (110) гантельного внедрения (рис. 11). Процесс захвата в этом случае существенно изменяется. Захват происходит не за счет прямого притяжения одного из атомов гантели к гелию. Один из атомов гантельного внедрения замещает своего ближайшего соседа по линии, соединяющей центр гантели и атом гелия (направления  $\langle 111 \rangle$ ). Тот в свою очередь замещает атом гелия, выталкивая его в положение статического краудiona на ребро ячейки. Такая же цепочка замещений, но большей длины, проходит и при больших удалениях гелия от гантельного внедрения (вплоть до четвертого соседа вдоль  $\langle 111 \rangle$ ).

Параллельно с анализом процесса захвата определялась энергия связи кластера гелий — межузельный атом при их различных взаимных расположениях. Энергия связи положительна и близка по величине для всех положений кластера, когда осуществляется притяжение межузельного атома к атому гелия, заканчивающееся образованием статического краудiona в центре. Для всех остальных конфигураций энергия связи оказалась отрицательной.

Общая конфигурация зоны захвата, если понимать под захватом образование комплекса примесь — межузельный атом с положительной энергией связи, имеет существенно анизотропный вид и вытянута вдоль направления  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ . Захват всегда заканчивается формированием одной и той же конфигурации кластера ( $\text{He} + i$ ): гелий переходит из состояния замещения во внедрение, образуя статический краудин в направлении  $\langle 100 \rangle$ , а собственный межузельный атом занимает его место в решетке. Процесс захвата напоминает спонтанную аннигиляцию пары Френкеля. Гелий, обладая малым радиусом, образует вокруг себя поле смещений, качественно напоминающее поле смещений вокруг вакансии. Межузельный атом устремляется в это разрежение. Аналогичного поведения межузельных атомов при захвате примесью следует ожидать и для других малых примесей.

Указанный процесс захвата, когда в результате его происходит существенная перестройка исходной конфигурации кластера ( $\text{He} + i$ ), можно классифицировать как «сильный» захват. Одним из следствий сильного захвата является смена ролей собственного межузельного атома и атома примеси (атом гелия переходит в междоузлие).

Моделирование хода реакций примесей с вакансиями и межузельными атомами поставяет важную информацию для формирования теории отжига дефектов. Но громоздкость расчетов тормозит развитие этих исследований. Более интенсивно развивается моделирование конечных продуктов этих реакций: смешанных комплексов, куда наряду с примесями входят вакансии и межузельные атомы.

Андерман и Геман исследовали методом динамического моделирования большой набор ксенон-вакансионных кластеров в меди<sup>80</sup>. Результаты представлены в табл. VII. Второй и третий столбец содержит число вакансий ( $N_V$ ) и число атомов ксенона ( $N_{Xe}$ ) в кластере. Число вакансий в кластерах было доведено до 15, а атомов ксенона — до 12. В четвертом столбце приведена полная энергия образования для  $N_V$  изолированных вакансий и  $N_{Xe}$

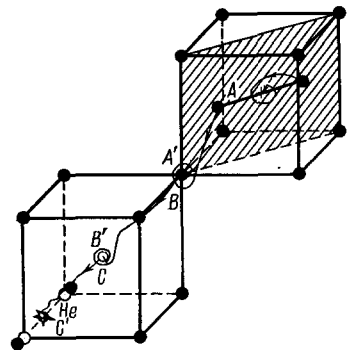


Рис. 11. Цепочка замещений в  $\alpha$ -железе при захвате собственного межузельного атома атомом гелия<sup>72</sup>.

Атом гелия находился в плотноупакованном ряду (111) на месте второго соседа по отношению к центру гантельного внедрения. Движение атомов окружения не показано. А и А' — начальное и конечное положения одного из атомов гантельного внедрения; В и В' — начальное и конечное положения атома в цепочке замещений; С и С' — начальное и конечное положения атома гелия (двухцветный кружок).

Энергетические характеристики ксенон-вакансионных кластеров в меди (эВ)<sup>80</sup>

Дефект	$N_V$	$N_{Xe}$	$N_V E_V + N_{Xe} E_{Xe}$	$E_F$	$E_B/N_{Xe}$
1	0	1	5,67	5,67	—
2	0	2	11,34	12,08	-0,37
3	0	2	11,34	11,34	0
4	1	1	6,67	6,05	0,62
5	1	2	12,34	10,94	0,70
6	1	2	12,34	10,96	0,69
7	2	2	13,34	10,72	1,31
8	4	2	15,34	10,05	2,65
9	4	2	15,34	12,08	1,63
10	6	2	17,34	13,00	2,17
11	4	4	26,68	22,77	0,98
12	0	13	73,7	80,9	-0,55
13	1	12	69,0	74,2	-0,43
14	6	13	79,7	75,6	0,32
15	7	12	75,0	68,8	0,52
16	14	13	87,7	67,4	1,56
17	15	12	83,0	60,6	1,87

изолированных атомов ксенона (в положении замещения) в решетке меди.  $E_V = 1,00$  эВ — энергия образования вакансии,  $E_{Xe} = 5,67$  эВ — энергия образования ксенона замещения,  $E_F$  — энергия образования смешанного кластера,  $E_B/N_{Xe}$  — энергия связи на атом ксенона.

Из таблицы видно, что кластеры, состоящие из одних атомов ксенона без вакансий, нестабильны. Нестабильны и те смешанные кластеры, в которых отношение числа вакансий к числу атомов ксенона,  $N_V/N_{Xe}$ , мало (см., например, кластер 13). Эти результаты можно понять, принимая во внимание большой размер ксенона по сравнению с атомами меди.

Присутствие вакансий стабилизирует ксенонные кластеры, т. е. дает увеличение энергии связи. Это заключение можно проиллюстрировать посредством сравнения дефектов 3 и 6, где нестабильный диксеноновый кластер приобретает стабильность за счет присоединения единичной вакансии.

Помимо отношения  $N_V/N_{Xe}$ , на энергию связи  $E_B/N_{Xe}$  влияет и пространственное распределение вакансий в кластере. Так, в кластере 9 и отношении  $N_V/N_{Xe}$  и расположении атомов ксенона такие же, как в кластере 8. Однако величина  $E_B/N_{Xe}$  в кластере 9 на 1 эВ меньше за счет другого расположения вакансий. Влияние пространственного расположения вакансий такое, что для данного значения  $N_V/N_{Xe}$  отношение  $E_B/N_{Xe}$  велико, когда каждая вакансия в кластере взаимодействует с максимальным числом газовых атомов.

Похожим образом ведут себя аргон-вакансионные кластеры в меди<sup>81</sup>.

Помимо кластеров, содержащих ксенон и аргон, с помощью методов моделирования изучалось образование гелий-вакансионных кластеров в меди<sup>69</sup>, гелиевые пузыри в ГЦК-металлах<sup>82</sup>, дивакансии с гелием<sup>84</sup> и другие смешанные образования (подробнее см. в обзоре<sup>84</sup>).

#### е) Процессы миграции дефектов в кристаллах

Перемещаясь по кристаллу, точечный дефект переходит из одной устойчивой конфигурации в другую, преодолевая разделяющий их энергетический барьер — седловую точку в потенциальном рельефе кристалла. Энергия активации миграции  $E_m$  определяется как разность потенциальных энергий кристалла с дефектом в седловой точке и в равновесной конфигурации. При

тепловых колебаниях решетки атомы, образующие точечный дефект (например, окружающие вакансию) время от времени приобретают кинетическую энергию, достаточную для преодоления одним из них барьера  $E_m$ . Однако проследить при этом всю траекторию системы в многомерном конфигурационном пространстве пока не удастся, ибо имеющиеся алгоритмы учета тепловых колебаний в модели молекулярной динамики <sup>16</sup> не позволяют воссоздать устойчивый температурный режим в модельном кристалле, который существовал бы продолжительное время. А именно это условие необходимо для имитации больших времен ожидания, свойственных процессу термоактивированной миграции дефектов. Поэтому в настоящее время основным приемом моделирования процесса миграции остается определение конфигурации дефекта и ее энергии в седловой точке. Седловую точку приходится задавать гипотетически в отсутствие тепловых колебаний, исходя из соображений геометрии дефекта и решетки. Это приводит к неопределенности в нахождении путей миграции. Моделирующие расчеты приходится многократно повторять, чтобы затем отобрать наиболее энергетически выгодные пути продвижения дефекта. Но даже такой громоздкий подход позволил существенно продвинуться в понимании процесса миграции дефектов.

Так, было установлено, что процесс миграции вакансии заключается в перескоке одного из ближайших к ней атомов в вакансию. Это приводит к образованию на его месте новой вакансии и к исчезновению старой.

Перемещение бивакансии в ОЦК- и ГПУ-решетках происходит путем перехода одного из атомов, соседствующих одновременно с обеими вакансиями, на место одной из них. Перемещение бивакансии в  $\alpha$ -Fe оказалось более сложным: каждая из ее вакансий перемещается отдельно от другой, причем в два этапа. На первом этапе одна из вакансий уходит в четвертую координационную сферу. На втором этапе восстанавливается стабильная конфигурация с вакансией в другом узле. Энергия такого перемещения меньше вычисленной  $E_m$  для моновакансий (0,68 эВ), хотя и близка к ней (0,66 эВ для  $\alpha$ -Fe) <sup>17</sup> \*).

По расчетам Билера <sup>57</sup> наиболее крупным подвижным вакансионным кластером в ОЦК-металле  $\alpha$ -Fe оказалась тривакансия, которая мигрировала с энергией активации 0,66 эВ. Более крупные вакансионные кластеры для перемещения по кристаллу вынуждены частично диссоциировать. Например, кластеру из четырех вакансий для продвижения энергетически выгодно диссоциировать на моно- и тривакансию (энергия активации такой диссоциации для  $\alpha$ -Fe равна 1,2 эВ) <sup>57</sup>.

Процесс перемещения междуузельных атомов оказался несколько сложнее, чем в случае вакансий. Для гантели вдоль [110] в ОЦК-кристалле один из вариантов этого процесса изображен на рис. 12, г. Исходная гантель по [110] с центром в (000) после одного перескока переходит в гантель по [101] с центром (1/2, 1/2, 1/2). Энергия активации такого перемещения для

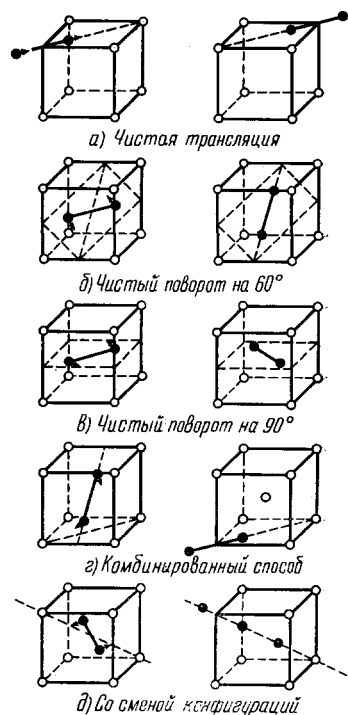


Рис. 12. Способы диффузионного перемещения междуузельного атома в ОЦК-решетке <sup>88, 89</sup>.

\*) Здесь и далее приводятся только отдельные численные значения энергии активации, так как имеется подробная подборка для многих кристаллов <sup>88</sup>, куда мы и отсылаем читателя.

$\alpha$ -железа] равна 0,33 эВ<sup>17</sup>. Аналогично (с изменением своей ориентации) мигрирует гантель [100] в ГЦК-решетке<sup>86</sup>.

Энергия активации вращения гантели в  $\alpha$ -железе вокруг своего центра (см. рис. 12, в) также равна 0,33 эВ<sup>17</sup>. Перемещение краудионной конфигурации межузельного атома (см. рис. 2) в  $\alpha$ -Fe вдоль направления плотной упаковки имело наименьшую энергию активации, равную 0,04 эВ<sup>17</sup>. Ряд

других способов перемещения межузельного атома в ОЦК-решетке изображен на рис. 12.

Следует обратить внимание на способ перемещения межузельного атома со сменой конфигурации, изображенный на рис. 12, д. Возможность такого перемещения обнаружена при прямом моделировании акта перемещения. Идея такого машинного эксперимента заключается в следующем. В модельном кристаллите формируется исследуемая конфигурация дефекта (дефекта-свидетеля). Затем кристаллит как бы локально подогревается. Таким локальным «подогревателем» может служить, например, образование или схлопывание нестабильной пары Френкеля вблизи дефекта<sup>87, 90</sup>. Выделившейся при этом энергии хватает на активацию перемещения дефекта-свидетеля. Прыжок дефекта со сменой конфигурации (гантельное внедрение перешло в краудион) был обнаружен в  $\alpha$ -железе под действием захлопывания нестабильной пары Френкеля, образованной вдоль направления  $\langle 111 \rangle$  (рис. 13)<sup>89</sup>.

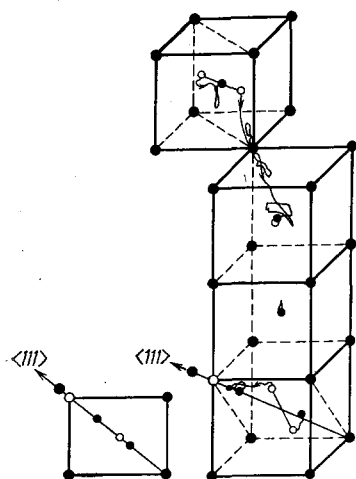


Рис. 13. Движение межузельного атома-свидетеля при захлопывании нестабильной пары Френкеля, расположенной в верхней части рисунка<sup>87</sup>.

Новая конфигурация переместившегося межузельного атома (статический краудион) изображена слева отдельно.

Продвижение наиболее стабильного бивнедрения в ОЦК-кристалле исследовал Джонсон<sup>17</sup>. Он показал, что перемещение такой пары — ступенчатый процесс, когда в переходной стадии межузельные атомы частично диссоциируют. Энергия перемещения для  $\alpha$ -железа равна 0,18 эВ.

Перемещение смешанных гантелей (примесь — атом матрицы) оказалось более сложным процессом, чем перемещение собственного межузельного

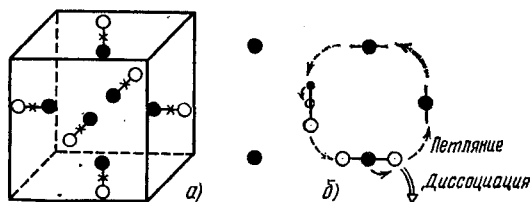


Рис. 14. а) Эффект клетки<sup>79</sup> (показаны позиции, занимаемые смешанной гантелью при легкой миграции примеси в «клетке» в ГЦК-кристалле; темный кружок — атом примеси, светлый — атом матрицы); б) петляние примеси в ГЦК-кристалле<sup>79, 71</sup> (последовательно показан развал смешанной гантели и скачок атома матрицы в соседний узел; образование нового гантельного внедрения; обход собственным межузельным атомом элементарной ячейки и его возвращение к примеси с другой стороны; большие кружки — атомы матрицы, малый кружок — атом примеси).

атома. Здесь, помимо акта миграции, аналогичного перемещению собственной гантели, предсказано еще два необычных процесса: эффект клетки (caging) и петляние (looping)<sup>79</sup>. Эффект клетки возникает из-за легкой миграции примеси по симметричным эквивалентным позициям внутри ограниченной конфигурации. Пример таких позиций, образующих «клетку», приведен на рис. 14, а. Петляние внедрения (с малой энергией активации) вокруг

примеси (рис. 14, б) приводит к изменению ориентации смешанной гантели на противоположную.

Влияние внешних напряжений на миграцию дефектов обнаружили Ингл и Крокер<sup>91</sup>, которые изучали воздействие одноосных напряжений на энергии связи дивакансий  $E_{2V}^B$  в ОЦК-кристаллах ( $\alpha$ -Fe, Mo, W). Они нашли, что  $E_{2V}^B$  увеличивается или уменьшается в зависимости от направления приложения напряжения и ориентации бивакансии. Изменение энергии связи кластеров влечет за собой изменения в процессе миграции, облегчая или затрудняя его.

#### 4. ЯДРА ДИСЛОКАЦИЙ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИЙ С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Расчеты на ЭВМ ядра дислокации в различных кристаллах первоначально имели целью уточнить полуфеноменологические представления об его тонкой структуре. В дальнейшем были выявлены детали этой структуры, существенно влияющие на течение пластической деформации кристаллов с ОЦК-, ГПУ- и другими решетками.

В полуфеноменологической модели ядра рассматривается расщепление полной дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  на  $n$  частичных дислокаций с векторами Бюргерса  $\mathbf{b}'_i$  такими, что  $\mathbf{b} = \sum_n \mathbf{b}'_i$ . Между частичными дислокациями располагаются полосы дефектов упаковки с поверхностной энергией  $\gamma$  (вообще говоря неодинаковой для разных полосок; см. ниже). Если  $\gamma \approx 10$  мДж/м<sup>2</sup>, как бывает в ряде сплавов, расщепление велико, ширина  $l$  полосок составляет несколько нм, и они хорошо разрешаются в обычном электронном микроскопе. Но если  $\gamma$  составляет сотни мДж/м<sup>2</sup>, ширина  $l$  не превышает нескольких межатомных расстояний, и следует говорить не о расщеплении, а о сложной структуре ядра дислокации. Лишь в последние годы она стала доступной наблюдению в электронных микроскопах высокого разрешения, хотя многие детали остаются невыясненными до сих пор. Сюда относятся перестройки ядра при скольжении дислокации, определяющие величину напряжения Пайерлса  $\tau^P$ , при котором прямая дислокация трогается с места \*).

С помощью машинного моделирования такие детали удастся выявить, если задать смещения атомов на границе микрокристаллита, в котором находится дислокация, соответствующие касательному напряжению  $\tau$ , приложенному к кристаллу.

Другая задача машинного моделирования — вычисление и сопоставление различных конфигураций ядра и выяснение атомных механизмов перестройки одной конфигурации в другую, в частности, на движущейся дислокации и в кристаллах со сложной элементарной ячейкой.

Поскольку дислокация — дефект, имеющий в одном измерении макроскопические размеры, расчеты структуры ядра практически возможны только для таких ориентаций  $\mathbf{t}$  линии дислокации, при которых период идентичности кристалла вдоль  $\mathbf{t}$  составляет не более нескольких межплоскостных расстояний. Для краевой, винтовой, 60°-ной и некоторых других наиболее важных ориентаций это условие выполняется. Малые отклонения от таких ориентаций осуществляются с помощью перегибов. Их эффективная ширина  $W$  тем больше, чем меньше  $\tau^P$ . Для ГЦК- и щелочногалоидных кристаллов  $W$  составляет несколько десятков межатомных расстояний и выполненные для них расчеты атомной структуры перегибов мало надежны. В ОЦК-

\*) При конечной температуре дислокация начинает двигаться при меньших напряжениях путем зарождения парных перегибов. Тем не менее  $\tau^P$  является важной характеристикой дислокации, поскольку она определяет вероятность термофлукуационного зарождения парного перегиба.

кристаллах  $W$  меньше и умещается в доступной современным ЭВМ расчетной ячейке, содержащей несколько тысяч атомов.

Простейшими характеристиками ядра нерасщепленной дислокации, получаемыми с помощью машинного моделирования, являются радиус ядра  $r_c$  и энергия ядра  $E_c$ , рассчитанная на период идентичности вдоль линии дислокации, который для винтовой дислокации равен вектору Бюргерса. Для определения  $r_c$  и  $E_c$  вычисляют энергию кристалла с дислокацией как функцию радиуса  $R$  цилиндра с осью, совпадающей с осью дислокации. На графике  $E(\ln R)$  при  $R \ll 2b$  имеется сильный разброс точек, но, начиная с некоторого  $R_c$ , точки хорошо укладываются на прямую, которая соответствует выражению теории упругости  $E = Kb^3 \ln(R/r_c)$ , где для краевой дислокации в изотропной среде  $K = G/[4\pi(1-\nu)]$ . Совпадение полученных с помощью машинного моделирования и по теории упругости значений  $K$  служит критерием правильного выбора межатомного потенциала. Значение  $R_c$  принимают за радиус ядра  $r_c$ , а энергия ядра равна  $E(r_c)$ . Поскольку в определении  $r_c$  имеется элемент произвола, приводимые ниже значения  $r_c$  и  $E_c$  следует рассматривать лишь как иллюстративные.

Поясним способ определения  $\tau^P$ , одинаковый для кристаллов любой симметрии. Атомам на границе микрокристаллита задают смещения, соответствующие упругой деформации кристалла  $\varepsilon = \tau/2G$  под действием приложенного параллельно плоскости скольжения касательного напряжения  $\tau$ , которое шаг за шагом возрастает. Для каждого значения  $\tau_i$  находят равновесную конфигурацию ядра. При некотором критическом  $\tau_i = \tau_c$  ядро теряет устойчивость, дислокация смещается на расстояние, равное периоду  $a$  рельефа Пайерлса, и воспроизводится исходная структура ядра. Сдвиговая деформация при этом уменьшается (релаксирует). Если касательные смещения на границе поддерживать постоянными, ядро смещается в следующую канавку пайерлсовского рельефа и так далее, пока не достигнет боковой грани в микрокристаллите. Напряжение, при котором ядро теряет устойчивость, принимается за напряжение Пайерлса  $\tau^P$  \*).

#### а) ГЦК-кристаллы

Первые расчеты <sup>92</sup> ядра краевой дислокации в меди, выполненные вариационным методом с использованием потенциала Морза, подтвердили представление о расщеплении дислокации. Как и следовало ожидать, ширина полоски дефекта упаковки сильно зависит от выбора межатомного потенциала, а также от граничных условий (размера микрокристаллита) <sup>93</sup>.

Если энергию дефекта упаковки  $\gamma$  не использовать в качестве подгоночного параметра при конструировании потенциала, согласующиеся с экспериментальными данными ширины дефектов упаковки для винтовой дислокации в Al, Cu и Ag дает модифицированный метод волн статических смещений <sup>94</sup>, в котором вычисления проводятся с применением межатомных потенциалов <sup>32</sup>. Таким способом для Al вычислены позиции атомов, когда ось винтовой дислокации  $a/2$  [110] лежит в плоскости  $z = a/2$  (A) и в параллельной плоскости  $z = a/4$  (B). В случае B энергия ядра несколько меньше и оно расщеплено слегка ( $l \approx a$ ) в плоскости (001). В случае A  $l \approx 3a$  и дефект упаковки лежит в плоскости {111}. Для Cu и Ag просчитан только случай B, дислокация расщеплена в плоскости {111}, в Cu  $l \approx 3a$ , в Ag  $l \approx 8a$  и частичные дислокации четко разделены.

\*) Менее точный метод определения  $\tau^P$  состоит в том, что вычисляют энергию ядра  $U$  в разных релаксированных конфигурациях, различающихся заданным взаимным смещением  $\Delta x$  двух выбранных атомных рядов по разные стороны от плоскости скольжения, причем  $\Delta x$  изменяется от 0 до  $a$ . Максимальная разность энергий  $U(\Delta x) - U(0)$  принимается за работу сил Пайерлса  $\tau^P b \Delta x$ .



## б) ОЦК-кристаллы

В первой подробной публикации<sup>95</sup> о расчете структуры ядра краевой дислокации с вектором Бюргерса  $a/2 \langle 111 \rangle$  в плоскости  $\{110\}$  в железе, выполненном вариационным методом, приводится энергия ядра на период идентичности (6 атомных плоскостей  $\{112\}$ )  $E_c = 2,7$  эВ, напряжение Пайерлса  $\tau^P = 0,0066 G$ . Дислокация практически не расщеплена, радиус ядра  $r_c = 0,3 - 0,5$  нм.

Эти расчеты получили развитие в работах<sup>96-98</sup> и других, имевших, в частности, целью проверить возможность расщепления невинтовой дислокации с выходом из первоначальной плоскости скольжения.

Гелен, Розенфилд и Хан<sup>96</sup> рассчитали методом молекулярной динамики структуру ядра краевой дислокации с вектором Бюргерса  $a \langle 100 \rangle$ , которая образуется при слиянии двух дислокаций  $a/2 \langle 111 \rangle$  в пересекающихся плоскостях скольжения и может рассматриваться как зародыш микротрещины. Использовались потенциалы Джонсона<sup>17</sup> I и II для железа и жесткие граничные условия, смещения атомов на границе микрокристаллита вычислялись по изотропной теории упругости. Потенциал II, при определении констант которого по значениям постоянных упругости не вносились поправки на учет электронов проводимости, дает несколько лучшее согласие значений энергии  $U$  (наклон кривой  $U(\ln r)$  при  $r > r_c$ ), вычисленных по теории упругости и через парные межатомные взаимодействия. В ядре плоскость скольжения дислокации заметно искривлена.

Де-Хоссон и др.<sup>98</sup> исследовали структуру ядра краевой дислокации  $a/2 \langle 111 \rangle$  в плоскости  $\{110\}$  в V, W, Mo и Fe, используя составной полиномиальный потенциал Джонсона и Уилсона<sup>99</sup>, жесткие граничные условия, соответствующие анизотропной теории упругости и динамический метод Виньярда. Учет упругой анизотропии приводит к заметным (до  $0,07 a_0$ ) смещениям атомов ядра вдоль оси дислокации  $\langle 112 \rangle$ . Взаимные смещения атомов в направлении вектора Бюргерса изменяются плавно с удалением от оси дислокации, лишь в V имеется намек на формирование полоски дефекта упаковки, что связано, однако, с видом потенциала  $\phi(r)$ . В литературе обсуждались различные моды расщепления краевой дислокации<sup>100-101</sup>. Результаты<sup>98</sup> можно рассматривать лишь как намек на такие расщепления.

Смешанная дислокация с вектором Бюргерса  $a/2 \langle 111 \rangle$  ориентации  $\langle 110 \rangle$  в W рассчитана в работе<sup>102</sup> с потенциалом Билера<sup>103</sup>. Получены значения  $r_c = 0,4$  нм,  $E_c = 3,0 - 3,5$  эВ.

Учет d-электронов и взаимодействия атомов во второй координационной сфере при определении полной энергии кристалла с дефектом приводит к заметным изменениям структуры ядра краевой дислокации<sup>42</sup>. В зависимости от соотношения констант экранирования  $q$  и  $p$  в формуле (24) распределение плотности вектора Бюргерса в плоскости скольжения  $(112) b'(x)$  имеет либо два горба на расстоянии около  $3a_0$  при полной ширине дислокации на полувысоте горба  $b'$  около  $5,5a_0$  (при  $q/p = 0,28$ ), что указывает на довольно четкое расщепление, либо один горб при ширине ядра около  $5a_0$  (при  $q/p = 0,20$ ). В плоскости скольжения  $(100)$  распределение  $b'(x)$  более острое с шириной горба около  $1,5a_0$ , причем при  $q/p = 0,28$  имеется по бокам главного пика  $b'(x)$  два симметричных маленьких, а при  $q/p = 0,20$  крылья главного пика плавные.

Значительно сложнее структура ядра винтовой дислокации в ОЦК решетке. Машинное моделирование позволило уточнить, при каких условиях реализуются предложенные различными авторами расщепления (см. обзор<sup>101</sup>). Оказалось, что результаты сильно зависят от выбора потенциала<sup>104</sup>, в частности, от радиуса обрезания  $r_0$ . При малых  $r_0$  (между радиусами второй и третьей координационных сфер  $r_2$  и  $r_3$ ) расщепление сильно выражено, при больших  $r_0$  — значительно слабее<sup>104, 105</sup>.

Упрощенный метод описания атомной конфигурации ядра винтовой дислокации предложил Судзуки <sup>106</sup>. Он ввел потенциал взаимодействия двух жестких атомных рядов, параллельных оси дислокации  $OZ$ , находящихся на расстоянии  $r_1$ , характерном для бездефектной решетки, и взаимно смещенных вдоль  $OZ$  на долю  $\xi = (z_i - z_j)/b$  периода идентичности  $b$  вдоль  $OZ$ :

$$\Phi_{ij} = A \cos 2\pi\xi, \quad A = \frac{b^2 (c_{11} - c_{12} + c_{44})}{6 \sqrt{3} \pi^2}. \quad (27)$$

При этом пренебрегают смещениями атомов по нормали к оси дислокации. Метод оказался полезным при моделировании движения дислокации под

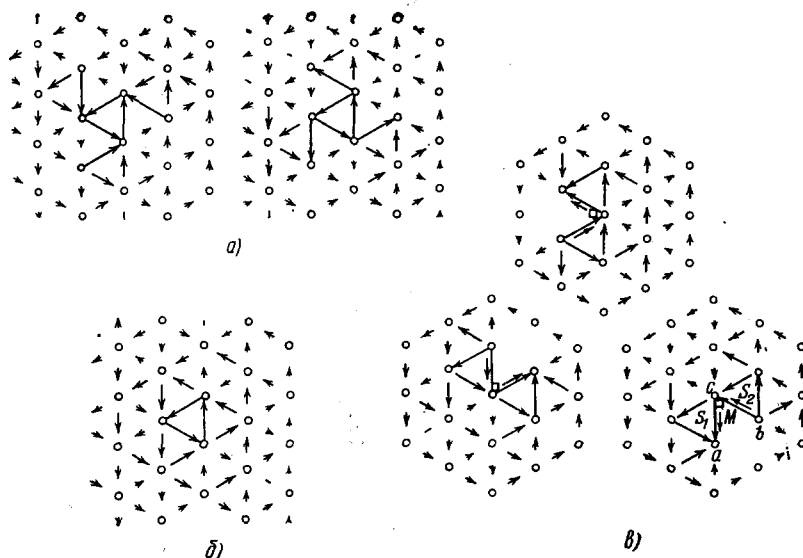


Рис. 15. Ядро винтовой дислокации в ОЦК-решетке <sup>108</sup>.

а) Дважды вырожденное устойчивое ядро; б) невырожденное ядро; в) трижды вырожденное метастабильное ядро.

действием внешнего напряжения и определения  $\tau^P$ , но он не выявляет тонких деталей структуры ядра.

Результаты расчетов удобно представить с помощью диаграммы дифференциальных смещений <sup>107</sup> (рис. 15), на которой кружки на проекции на плоскость  $\{111\}$  представляют атомные ряды  $\{111\}$ , а относительные смещения соседних рядов вдоль оси дислокации представлены стрелками между ними. Полная длина стрелки отвечает смещению  $b/3$ ; если смещение больше, добавляется вторая стрелка недостающей длины.

Более трудоемкие расчеты, свободные от недостатков метода <sup>106</sup>, проводятся по схеме парных взаимодействий отдельных атомов. Основные результаты сводятся к следующему <sup>108</sup> (см. рис. 15). Устойчивая структура ядра вырождена, ей соответствуют две конфигурации (рис. 15, а) с одинаковой энергией. При определенных типах потенциала взаимодействия рядов  $\Phi_{ij}$  и значениях его параметров (в <sup>108</sup> исследовано 4 типа потенциалов) возможна также невырожденная структура (рис. 15, б), а также трижды вырожденная структура «расщепленное ядро» (рис. 15, в), в которой ось дислокации почти совпадает с одним из рядов.

Под внешним касательным напряжением в плоскости  $\{110\}$  дислокация с вырожденным ядром (см. рис. 15, а) перемещается зигзагообразно, переходя из одной конфигурации в другую, причем результирующее направление скольжения лежит в плоскости  $\{112\}$  (направление  $1 \rightarrow 3$  на рис. 16) <sup>109</sup>. В случае, когда напряжение действует в плоскости  $\{112\}$  в двойникующем направлении, последовательность перестроек представлена на рис. 17,

а если в антидвойникующем направлении — на рис. 18. Невырожденная конфигурация (см. рис. 15, б) перемещается на одно межатомное расстояние в одной из плоскостей  $\{110\}$ , проходя через вырожденную конфигурацию (см. рис. 15, е) <sup>108</sup>.

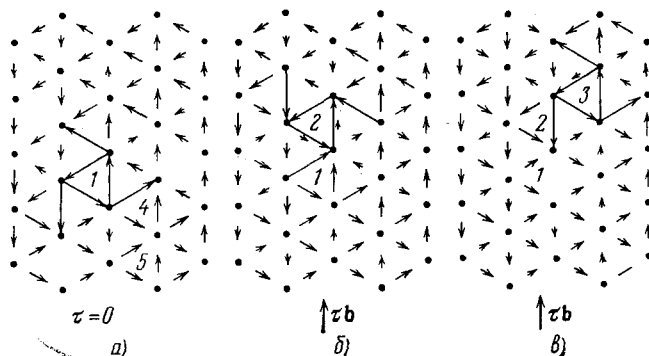


Рис. 16. Последовательные конфигурации ядра винтовой дислокации при ее перемещении под действием касательного напряжения в плоскости  $\{110\}$  <sup>109</sup>.

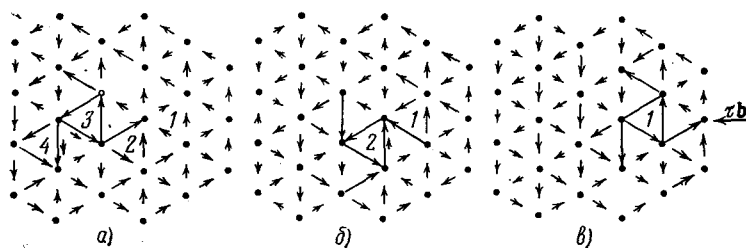


Рис. 17. Последовательные конфигурации ядра винтовой дислокации при ее перемещении под действием касательного напряжения в плоскости  $\{112\}$  в двойникующем направлении <sup>109</sup>.

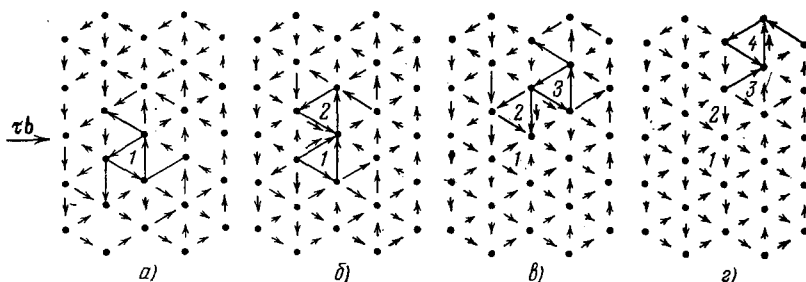


Рис. 18. То же, что на рис. 17, но сила  $\tau b$  действует в антидвойникующем направлении <sup>109</sup>.

Учет энергии d-электронов методом <sup>38</sup> и взаимодействия вторых соседей влияет также на структуру ядра винтовой дислокации  $a/2 \langle 111 \rangle$ . Как показано на примере Nb,  $\alpha$ -Fe, W в <sup>110</sup>, в зависимости от того, куда поместить до релаксации центр дислокации, получается симметричная (невырожденная) или слегка расщепленная трехкратно вырожденная конфигурация (см. рис. 15, а, б). Если исходная конфигурация — расщепленная звездой на три частичные  $a/6 \langle 111 \rangle$  дислокации, то при релаксации она переходит в структуру рис. 15, а, а исходная плоская конфигурация  $a/3 \langle 111 \rangle + a/6 \langle 111 \rangle$

переходит в структуру рис. 15, б. Хотя обе конфигурации получаются и без учета энергии d-электронов, энергия конфигурации рис. 15, б при учете d-электронов оказывается меньше (табл. VIII). Учет взаимодействия только

Таблица VIII  
Энергия винтовой дислокации  
на атомную плоскость, эВ

Конфигурация на рис. 15	Рис. 15, а	Рис. 15, б
Nb	0,3338	0,2790
$\alpha$ -Fe	0,5342	0,5014
$\alpha$ -Fe	0,5800 *)	0,5810 *)
W	1,3380	1,2530

\*) Без учета энергии d-электронов.

ближайших соседних атомов дает после релаксации значительно сильнее расщепленные конфигурации. Авторы<sup>110</sup> заключают, что расщепленное ядро винтовой дислокации — артефакт, что согласуется с выводом<sup>104</sup>. Чтобы в таком случае объяснить низкую подвижность винтовых дислокаций в ОЦК-решетке, необходимо перевычислить напряжение Пайерлса и структуру перегиба с учетом d-электронов.

К перечисленным структурам примыкает ядро двойнивающей винтовой дислокации в W в плоскости двойнирования  $(\bar{1}\bar{1}2)$ <sup>111</sup>. В ядре дислокации имеется область растяжения, куда притягиваются межузельные атомы. Их энергия связи с дислокацией равна 0,15 эВ. В этой работе предложен наглядный способ изображения распределения энергии в протяженных дефектах. Каждый атом обведен кружком, радиус которого пропорционален его энергии, вычисленной по формуле парного взаимодействия (см. также<sup>112</sup>).

#### в) ГПУ - кристаллы

Можно полагать, что одной из причин, по которым механические свойства различных ГПУ-металлов сильно различаются, является структура ядра дислокаций в них, обусловленная особенностями межатомных взаимодействий. Для ГПУ-металлов еще не построены межатомные потенциалы, описывающие эти особенности. Поэтому проведенные до сих пор расчеты базировались на потенциале Леннарда — Джонсона

$$\varphi(r) = \epsilon_0 \left[ \left( \frac{d}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{d}{r} \right)^6 \right], \quad (28)$$

где  $d \approx a$ ,  $a$  — межатомное расстояние в плоскости базиса,  $\epsilon_0$  подгоняется, например, под экспериментальные значения констант упругости и потенциал обрезается между 5-й и 6-й (LJ 5) или между 6-й и 7-й координационными сферами (LJ 6), разумеется, с плавным переходом от (28) к нулю с помощью подходящего полинома. Отношение осей  $c/a$  при этом получается соответственно 1,6260 и 1,6312.

Наиболее часто в ГПУ-кристаллах встречаются дислокации с вектором Бюргера  $b = a/3 \langle 1120 \rangle$ , которые могут скользять в плоскости базиса  $\{0001\}$  и в плоскости призмы  $\{10\bar{1}0\}$ . Конфигурации их ядер в краевой и винтовой ориентации исследовали Бэкон и Мартен<sup>113</sup> с потенциалами LJ 5 и LJ 6. Результаты представлены в виде диаграмм дифференциальных смещений, кривых взаимных смещений атомных рядов  $\Delta u(x)$  по разные стороны плоскости скольжения и кривых плотности вектора Бюргера  $\rho_x(x) = d \Delta u / dx$  (ось  $x$  направлена вдоль  $[21\bar{1}0]$ ,  $y$  — вдоль  $[01\bar{1}0]$ ,  $z$  — вдоль  $[0001]$ ).

Ядро краевой дислокации в плоскости призмы шире, чем дает теория упругости, но расщепления на отдельные частичные дислокации нет. Винтовая дислокация в плоскости базиса расщеплена, с потенциалом LJ 5 ее ширина  $W \approx 3a$ , с потенциалом LJ 6  $W \approx 10a$  (рис. 19). Краевая дислокация в плоскости базиса дает с потенциалом LJ 5  $W = 7-8 a$ , причем

каждая частичная дислокация на кривой  $\rho(x)$  имеет раздвоенный пик (рис. 20).

Под возрастающим напряжением  $\tau = 2G\epsilon$  структура ядра (в отличие от ОЦК-кристаллов) сначала сильно деформируется, пока при критическом значении  $\tau^P$  дислокация не сместится на расстояние  $a$ . Значения  $\epsilon^P$ , соответствующие  $\tau^P$ , приведены в табл. IX. Дислокации в плоскости призмы под

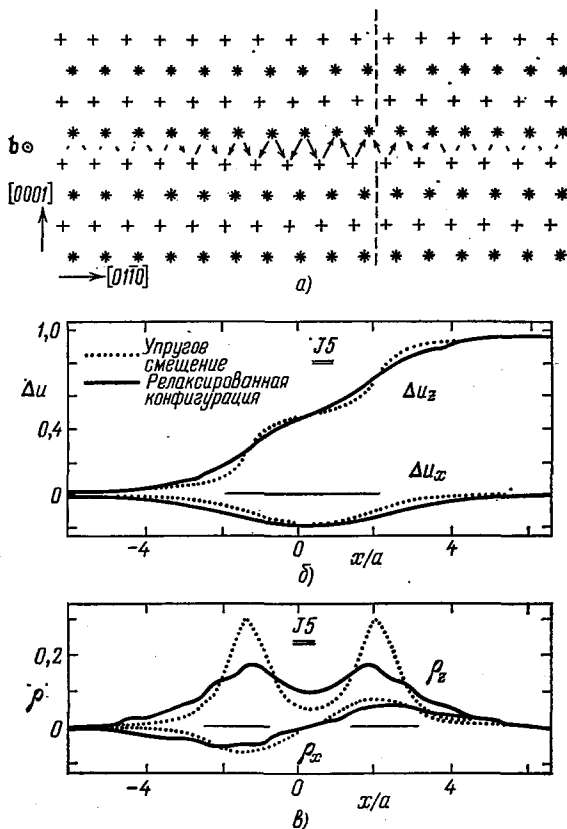


Рис. 19. Винтовая дислокация в плоскости базиса ГПУ-решетки <sup>113</sup>.

а) Проекция атомов на плоскость (2110), потенциал LJ5; б) смещения  $\Delta u_z$  и  $\Delta u_x$  в единицах  $a$ ; в) плотности вектора Бюргера  $\rho_z(x)$  и  $\rho_x(x)$ .

напряжением  $\tau$  также остаются нерасщепленными. Деформация ядра расщепленной в плоскости базиса винтовой дислокации под действием касательного напряжения в плоскости призмы происходит не путем сближения двух частичных дислокаций (см. рис. 19), а путем увеличения вектора Бюргера одной за счет вектора Бюргера другой, после чего дислокация скользит в плоскости призмы (рис. 21).

С теми же потенциалами (28) выполнены расчеты ядра дислокаций с вектором Бюргера  $b = a/3 \langle 1123 \rangle$ , которые могут скользить в пирамидальных плоскостях  $\{1122\}$  и  $\{1011\}$ . Ядро краевой дислокации в плоскости  $\{1122\}$  может иметь две конфигурации. Одну (I) можно представить состоящей из двух двойников (1122) и (1121) справа и слева от центра дислокации (рис. 22, а) <sup>114</sup>. Вторая (II) <sup>115</sup> представляет собой две частичные дислокации с векторами Бюргера  $b/2$ , соединенные дефектом упаковки, причем левая дислокация связана с двумя двойниками (1122) и (1121), а правая — с одним (1122) (рис. 22, б). Под действием приложенного напряжения  $\tau$  в зависимости от направления силы  $\tau b$  либо ядро I перестраивается в ядро II и скользит

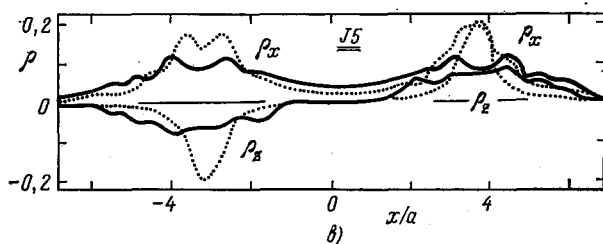
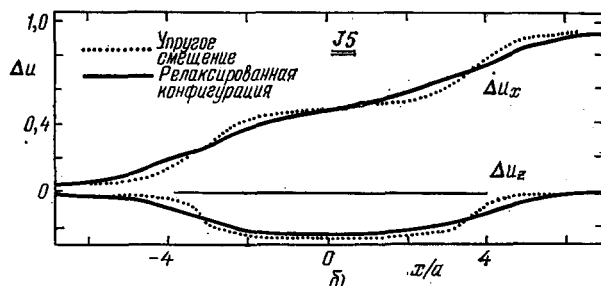
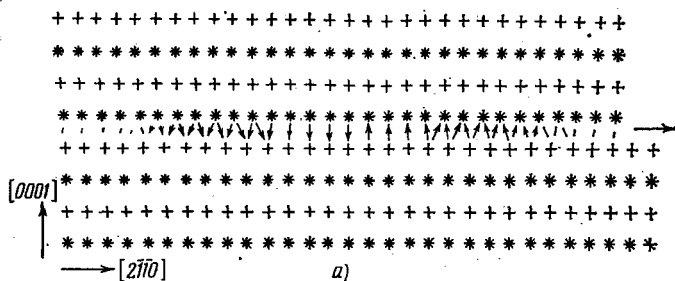


Рис. 20. Ядро краевой дислокации в плоскости базиса, потенциал LJ 5<sup>113</sup>.  
 а) Проекция атомов на плоскость (0110); б) смещения  $\Delta u_x$  и  $\Delta u_z$ ; в) плотности вектора Бюргерса  $\rho_x(x)$  и  $\rho_z(x)$ .

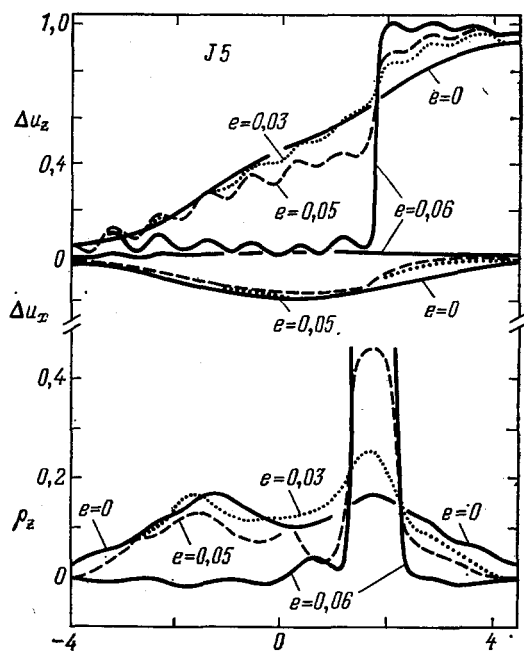


Рис. 21. Влияние увеличения деформации сдвига  $e$  в плоскости призмы на смещения  $\Delta u$  (в единицах  $a$ ) и плотность вектора Бюргерса  $\rho$  для винтовой дислокации в кристалле, имитируемом с помощью потенциала LJ 5<sup>114</sup>.

Таблица IX

Критические деформации  $\epsilon^P$ ,  
соответствующие напряжению Пайерлса  $\tau^P$  <sup>113</sup>

Потенциал	Краевая дислокация в плоскости		Винтовая дислокация в плоскости базиса, скользящая в плоскости	
	призмы	базиса	призмы	базиса
LJ5	0,022	0,011	0,053	0,015
LJ6	0,014		0,092	0,016

расщепленная дислокация, либо из обеих конфигураций образуется двойник <sup>115</sup>. Таким образом, одна и та же дислокация может в зависимости от условий деформирования осуществлять скольжение или двойникование.

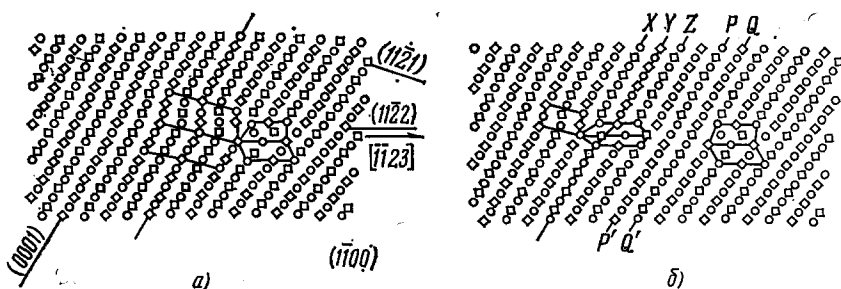


Рис. 22. а) Проекция конфигурации I ядра краевой дислокации на плоскость  $(\bar{1}100)$  <sup>115</sup> (показаны две двойникованные области; порядок чередования уровней, на которых расположены атомы, соответствует последовательности: квадрат, кружок, шестиугольник, ромб); б) проекция конфигурации II ядра краевой дислокации на плоскость  $(\bar{1}100)$  <sup>115</sup>.

Винтовая дислокация расщепляется на две частичные с вектором Бюргера  $a/6 \langle 1123 \rangle$ , причем дефект упаковки может состоять из нескольких

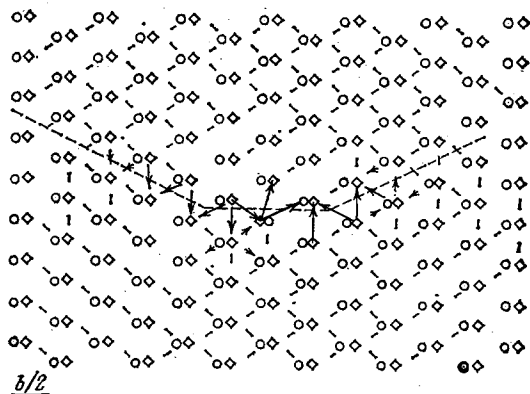


Рис. 23. Конфигурация ядер винтовых дислокаций, размазанных по плоскостям  $(1011)$ ,  $(1122)$ ,  $(0111)$  <sup>116</sup>.

Проекция на плоскость  $(\bar{1}123)$ . Стрелками показаны взаимные смещения атомных рядов только одного сорта, обозначенных квадратами.

стыкующихся полосок, лежащих попеременно в плоскостях  $\{10\bar{1}1\}$  и  $\{11\bar{2}2\}$ , энергии  $\gamma$  которых почти равны (рис. 23) <sup>116</sup>. Обсуждавшиеся в литературе зональные двойничающие дислокации не обнаружены.

## г) Упорядоченные сплавы

В упорядоченных сплавах вектор трансляции, как известно, больше, чем в той же неупорядоченной решетке. В частности, в ГЦК-структуре  $L1_2$ , характерной для многих сплавов типа  $A_3B$ , например,  $Cu_3Au$ , вектор Бюргера полной дислокации (называемой также сверхдислокацией) равен  $2b$ , где  $b$  — межатомное расстояние. Такой дислокации выгодно расщепиться в плоскости скольжения  $\{111\}$  на две частичные, между которыми лежат полоски со структурой собственного дефекта упаковки с энергией  $\gamma$ , либо антифазной границы (АФГ) с энергией  $\xi$ . Расщепление происходит согласно реакциям

$$a [\bar{1}01] \rightarrow \frac{a}{3} [\bar{2}11] + \frac{a}{3} [\bar{1}\bar{1}2], \quad (29)$$

либо

$$a [\bar{1}01] \rightarrow \frac{a}{2} [\bar{1}01] + \frac{a}{2} [\bar{1}01] \pm a \frac{\chi_a}{6} [\bar{1}2\bar{1}]. \quad (30)$$

В случае (30) каждая из составляющих дислокаций  $a \langle 110 \rangle$  может в свою очередь претерпеть кристаллографическое расщепление на две частичные дислокации в той же плоскости, либо, если дислокации винтовые, то в одной из пересекающихся плоскостей поперечного скольжения  $\{111\}$ . Может оказаться выгодным понизить энергию АФГ путем сдвига в направлении  $[\bar{1}2\bar{1}]$  на величину  $\chi_a \sqrt{6}$ , которая зависит от вида межатомных потенциалов  $\Phi_{AA}$  и  $\Phi_{BB}$ , что и выражается последними слагаемыми в (30).

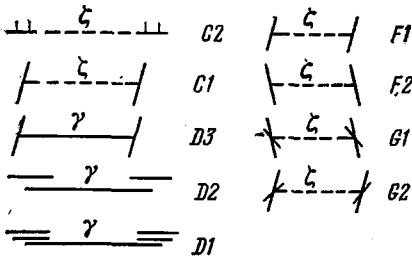


Рис. 24. Схемы сверхструктурного и кристаллографического расщепления дислокации  $b = a \langle 110 \rangle$  в решетке  $L1_2$ .

Кристаллографическое расщепление каждой из частичных дислокаций  $a/2 \langle 101 \rangle$  может произойти в плоскости  $(\bar{1}\bar{1}1)$  ( $F_1$ ) и  $(111)$  ( $F_2$ ). Расчет с более плавным потенциалом дает размазывание ядра винтовой частичной дислокации по обоим плоскостям  $(\bar{1}\bar{1}1)$  и  $(111)$  ( $G_1, G_2$ ).

Тип расщепления определяет подвижность дислокаций и, в частности, механизм поперечного скольжения винтовой дислокации, которое ответственно за температурные аномалии предела текучести и другие уникальные механические свойства упорядоченных сплавов со структурой  $L1_2$ .

Первый расчет структуры ядра и рельефа Пайерлса нерасщепленной частичной винтовой дислокации с вектором Бюргера  $\langle 110 \rangle$  в сплаве  $Cu_3Au$  провели авторы <sup>118</sup>. Вторая дислокация пары не моделировалась из-за ограниченности памяти машины, а АФГ выходила на границу расчетной ячейки.

С целью выяснения условий, при которых осуществляются различные типы расщеплений, вычислены равновесные конфигурации ядра винтовой дислокации  $a \langle 110 \rangle$  в структуре  $L1_2$  в свободном состоянии и под касательным напряжением  $\tau$  с несколькими потенциалами взаимодействия  $\Phi_{AA}$  и  $\Phi_{AB}$ , которые дают разные значения энергий  $\gamma$  и  $\xi$  <sup>119</sup>. Найдено, что собственный дефект упаковки в плоскости  $\{111\}$  и АФГ в плоскости  $\{100\}$  устойчивы при любых потенциалах, так что сверхдислокация с вектором



Бюргерса  $a \langle 101 \rangle$  всегда расщепляется. Комплексный дефект упаковки (наложение дефекта упаковки и АФГ) и АФГ в плоскости  $\{111\}$  могут быть неустойчивыми, что приводит к «размазыванию» ядра и различного типа расщеплениям (см. рис. 24).

Под действием напряжения  $\tau$  скользящие конфигурации приходят в движение сравнительно легко, и критическое напряжение страгивания было практически равным  $\tau_c = \gamma'/b_p$ , где  $b_p$  — проекция вектора Бюргерса частичной дислокации на соответствующее направление  $\langle 110 \rangle$ , а  $\gamma'$  — энергия дефекта упаковки или АФГ. Для сидячих конфигураций  $\tau_c$  значительно выше и для его определения достаточно было исследовать поведение только одной частичной дислокации, учитывая присутствие второй только через ее упругое поле. Исследованы все представленные на рис. 24 конфигурации. Перестройки сидячих конфигураций в различные скользящие начинаются лишь при  $\tau = 0,03-0,04 G$ .

Сидячие конфигурации  $C1, D3, F, G$  на рис. 24 ведут себя по-разному. В частности, расщепление по (30) приводит к аномальному росту деформирующего напряжения  $\sigma$  при повышенных температурах, а расщепление по (29) — к росту  $\sigma$  при низких температурах (подобно ОЦК-металлам). Обсуждается влияние примесей, которые способствуют переходу структуры  $L1_2$  в гексагональную  $DO_{19}$  или в кубическую  $DO_{22}$ . Вторые усиливают температурные аномалии  $\sigma$ .

В упорядоченных сплавах с ОЦК-решеткой (В2) расчет<sup>120</sup> движения винтовой сверхдислокации с вектором Бюргерса  $a \langle 111 \rangle$  под действием напряжения  $\tau$  проведен в приближении жестких атомных рядов. Используются два потенциала взаимодействия рядов:

$$\Phi_I = \Phi_0 \left( \cos 2\pi\xi - \alpha \cos 4\pi\xi + \frac{1-\alpha}{2} \right) \quad (31)$$

и  $\Phi_{II}$ , спитый из пяти кусков парабол. Константы  $\Phi_0, \alpha$  и входящие в  $\Phi_{II}$  и  $\Phi_{II}$  определяют энергии  $\gamma$  и  $\xi$ , причем  $\xi$  и  $\alpha$  связаны соотношением<sup>121</sup>

$$\xi_{100} = \frac{\sqrt{3}Gb}{\sqrt{2}\pi^2(1-4\alpha)}. \quad (32)$$

Если  $\xi_{100} > 0,006 Gb$ , скольжение идет легче по плоскостям  $\{110\}$ , при  $\xi_{110} < 0,006 Gb$  — по  $\{112\}$ . Вычислена зависимость деформирующего напряжения  $\sigma$  от угла  $\chi$  между плоскостью максимального сдвигового напряжения и ближайшей плоскостью  $\{110\}$ . Большинство экспериментальных данных по ряду сплавов со структурой В2 согласуется с результатами расчетов.

Для дислокаций в более сложных металлических структурах пока аналогичных результатов нет.

#### д) Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами

Взаимодействия дислокаций с точечными дефектами являются определяющими в процессах старения, образования зон Гинье — Престона и выделений на дислокациях, радиационного роста и набухания, радиационной ползучести. Эти взаимодействия существенны на расстояниях порядка межатомных и требуют расчетов на атомном уровне (см. <sup>122-127</sup>).

Рассмотрим в виде примера работу Ингла и Крокера<sup>126</sup>, изучавших взаимодействие между вакансиями и краевой дислокацией  $1/2\langle 111 \rangle \{110\}$  в  $\gamma$ -железе, используя вариационный метод. Расчетная ячейка имела размеры 14 межплоскостных расстояний по нормали к плоскости скольжения  $\langle 110 \rangle$ , 36 межплоскостных расстояний вдоль вектора Бюргерса  $[111]$ , а вдоль линии дислокации  $[112]$  накладывались периодические граничные условия

через 6 (период повторяемости) или 18 межплоскостных расстояний. Поэтому фактически моделировалось взаимодействие дислокации не с одной вакансией, а со сплошной (6) или разреженной (18) цепочкой вакансий. Оба последующих дефекта (и дислокация и вакансия) в большинстве вариантов расчета вводились в модельный кристаллит одновременно, а затем производилась процедура минимизации энергии. При этом обнаружены нестабильные конфигурации. Эти неустойчивости контролировались с помощью другой методики, когда в начале рассчитывалась конфигурация дислокации, а затем

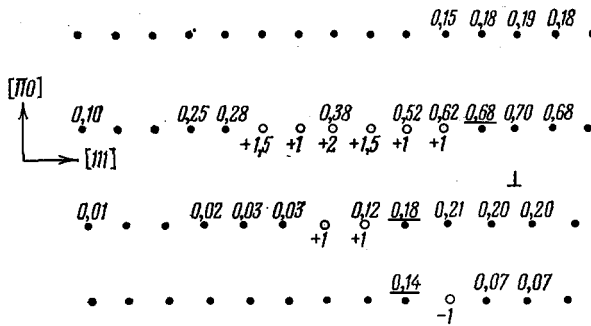


Рис. 25. Взаимодействие между вакансией и краевой дислокацией  $1/2 \langle 111 \rangle (110)$  в  $\alpha$ -железе<sup>126</sup>.

вводился второй дефект и производилась вторая минимизация. Кроме этого, варьировался потенциал межатомного взаимодействия.

Расчет наиболее важной характеристики — энергии взаимодействия вакансии и дислокации производился с помощью определения различных энергий, прямо получаемых в процессе моделирования. Если  $E^P$  — энергия

совершенного кристаллита, а  $E^{P+D}$  — энергия кристаллита, в который введена дислокация, то энергия связанная с дислокацией, определялась как  $E^D = E^{P+D} - E^P$ . Аналогично, энергия, связанная с вакансией, равна  $E^V = E^{P+V} - E^P$ , где  $E^{P+V}$  — энергия кристаллита, содержащего одну вакансию. Если энергию кристаллита, содержащего как дислокацию, так и вакансию, обозначить  $E^{P+D+V}$ , то энергия взаимодействия между двумя дефектами равна

$$E_1^{DV} = E^{P+D+V} - E^P - E^D - E^V = E^{P+D+V} - E^P - E^{P+D} - E^{P+V}. \quad (33)$$

На рис. 25 сведены результаты расчетов энергии взаимодействия вакансий с дислокацией  $1/2 \langle 111 \rangle \{110\}$ . Здесь приведена проекция на плоскость  $\{11\bar{2}\}$  релаксированной дислокационной конфигурации. Показана только левая половина проекции, поскольку конфигурация симметрична относительно плоскости  $(111)$ , проходящей через линию дислокации. Точками отмечены положения атомов, числа указывают энергию связи дислокация — вакансия  $E_1^{DV} (= -E_1^{DV})$  в эв. Расположение чисел соответствует тем атомным местам, где располагались вакансии. Все эти числа положительные, что указывает на притягивающее взаимодействие. В области сжатия выше плоскости скольжения энергии связи выше, чем в области разрежения, расположенной ниже плоскости скольжения. Это согласуется с предсказаниями на основе размерного эффекта в теории упругости (см., например, <sup>128</sup>), когда ожидается, что вакансии должны разрядить поле сжатия над плоскостью скольжения. Но тот факт, что энергия связи не меняет свой знак ниже плоскости скольжения, указывает на недостаточность учета только размерного эффекта.

Несколько (девять) атомных мест на рис. 25 изображено в виде окружностей. При помещении вакансии в эти положения центр ядра дислокации перемещался в плоскости скольжения на расстояние, указанное числом под окружностью (в единицах межплоскостного расстояния). Положительные числа отвечают движению навстречу вакансии. Однако этот эффект есть результат периодических граничных условий и описывает взаимодействие дислокации не с одной вакансией, а с цепочкой вакансий.

е) М и г р а ц и я т о ч е ч н ы х д е ф е к т о в  
в д о л ь д и с л о к а ц и и

Моделирование миграции дефектов вдоль ядер дислокации позволило уточнить механизмы процесса ускоренной трубочной диффузии, неоднократно отмечавшейся экспериментально<sup>129</sup>. Журавлев и Фидельман<sup>130, 131</sup> с помощью динамического метода с искусственной диссипацией энергии исследовали перескоки вакансий в ядре краевых дислокаций  $[100]$   $(010)$ ,  $1/2 [111]$   $(110)$  и  $1/2 [111]$   $(112)$  в ОЦК-металлах (железе, молибдене и вольфраме) и краевых дислокаций  $1/2 [110]$   $(111)$  в ГЦК-металлах (алюминии, серебре, золоте, меди и никеле). Путем удаления одного из атомов с края экстраплоскости нерасщепленной полной или изолированной частичной дислокации (ограничивающей дефект упаковки) создавалась единичная вакансия. Акт ее миграции моделировался дискретным перемещением  $(10-20)$  шагов одного из соседних атомов в направлении вакансии. На каждом шаге такого перемещения осуществлялась релаксация атомной структуры в расчетной ячейке и вычислялась избыточная энергия системы, связанная с текущим положением перемещенного атома. Таким образом определялся энергетический профиль пути миграции, на котором находилась точка перевала, и, следовательно, энергия активации миграции вакансии вдоль линии краевой дислокации. Аналогично определялась энергия активации перемещения вакансии в других точках ядер дислокаций и в объеме. Результаты расчетов сравнивались.

Установлено снижение энергии образования и миграции вакансий в ядрах дислокаций на  $30-40\%$  по сравнению с расчетными значениями для объема металла и в ГЦК- и в ОЦК-решетках. Радиус области ускоренной диффузии, если судить по энергии активации, составлял один — два вектора Бюргерса. Результаты этих расчетов, которые указывают на возможность ускоренной миграции вакансий по дислокациям, были подтверждены и другими авторами.

Миллер, Ингл и Крокер<sup>132</sup>, используя вариационную процедуру, изучали в ОЦК-металлах (железе и молибдене) диффузию вдоль ядер краевых дислокаций с вектором Бюргерса  $1/2 [111]$ , лежащих в плоскостях скольжения: а)  $(110)$  или б)  $(112)$ . Энергия активации трубочной самодиффузии  $Q_p$  рассчитывалась для миграции вакансий по наиболее выгодному пути. Для дислокаций а) и б) в Fe получено  $Q_p^{(a)} = 1,76$  эВ,  $Q_p^{(b)} = 1,26$  эВ. Рассчитанное в этой же модели значение для объемной самодиффузии  $Q_B = 2,05$  эВ. В Mo соответственно  $2,90$ ,  $2,25$  и  $3,81$  эВ. Следует, однако, заметить, что для нахождения значения  $Q_p$ , которое можно сопоставлять с измеренным, необходимо рассматривать все возможные траектории диффундирующего атома с учетом вклада каждой из них в суммарный диффузионный поток при данной температуре, а не только траекторию, проходящую через самые низкие барьеры.

Плишкин, Подчинов, Подчинова<sup>133, 134</sup> с помощью вариационного метода имитировали миграцию вакансии по ядру краевой дислокации с вектором Бюргерса  $b = a/2 [110]$  в ГЦК-решетке меди с учетом ее расщепления. Расчет высоты потенциального барьера перемещения вакансии начинался с релаксации микрокристаллита с краевой дислокацией. При этом происходило спонтанное расщепление дислокации на две частичные с образованием дефекта упаковки между ними. Вакансия формировалась удалением одного из атомов либо в области дефекта упаковки, либо в ядре частичной дислокации.

Далее, процедура расчета напоминала действия предыдущих исследователей. Анализ значений энергии миграции вакансии в ее различных положениях показал, что вакансия довольно легко может блуждать по плоскости дефекта упаковки в направлении от одной частичной дислокации к другой. Отношение коэффициента диффузии по этому направлению к коэффициенту

диффузии в матрице  $D_1/D_0$  может составлять несколько порядков. Авторы <sup>133, 134</sup> делают вывод, что наиболее интенсивный перенос диффундирующей компоненты должен происходить по центральной части дефекта упаковки.

### 5. ГРАНИЦЫ ЗЕРЕН В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ

Границы зерен — единственный вид дефектов, об атомной структуре которых до сих пор нет общепринятых представлений, хотя работы последних лет, выполненные методом машинного моделирования, и электронно-микроскопические исследования бикристаллов с разрешением атомных плоскостей в значительной степени закрыли это белое пятно.

Атомная структура границ зерен и зернограницных дислокаций (см. ниже) определяет механизмы зернограницного проскальзывания, миграции границ при рекристаллизации и пластической деформации, зернограницной диффузии и других явлений в поликристаллах. Ее выяснению посвящено много расчетов, выполненных за последние годы на ЭВМ. Остановимся кратко на способах описания границ.

Плоская межзеренная граница \*) определяется 5 параметрами: 3 угла фиксируют взаимный поворот двух зерен (2 угла — направление  $\theta/|\theta|$  единичного вектора оси поворота в пространстве,  $\theta$  — величину угла поворота около этого направления), 2 угла — направление единичного вектора нормали  $n$  к плоскости границы. Эти углы обычно задаются в системе координат, связанной с кристаллографическими осями одного из зерен. К макроскопическим параметрам  $\theta$ ,  $n$  добавляются 3 микроскопических — компоненты вектора  $g$  взаимного жесткого смещения зерен. Проекция  $g$  на  $n$  определяет, очевидно, избыточный объем границы, т. е. разность объемов бикристалла и монокристалла из такого же числа атомов, рассчитанную на единицу площади границы. Граница, у которой ось поворота лежит в ее плоскости ( $\theta \perp n$ ), называется границей наклона. У границы кручения  $\theta \parallel n$ . Остальные границы называются смешанными <sup>135</sup>.

Рассмотрим наложение (1, 2) двух решеток 1 и 2, разориентированных на угол  $\theta$ , у которых хотя бы один узел общий. Если в таком наложении провести произвольно плоскость границы  $n$ , по одну сторону от этой плоскости заполнить атомами узлы решетки 1, а по другую — узлы решетки 2, получится бикристалл.

Энергия границы  $U$  определяется как разность энергий бикристалла и энергии монокристалла из такого же числа атомов и рассчитывается на единицу площади границы. Атомная структура и энергия границы зависят от  $\theta$ ,  $n$  и от выбора положения плоскости границы в исходном наложении (1, 2), который определяет вектор  $n$ . Минимуму  $U$  отвечает значение  $g = g_0$ . Чтобы найти  $g_0$ , кристаллы 1 и 2 сначала взаимно смещаются как жесткие (жесткая релаксация), пока не будет получено минимальное значение  $U$ . Дальнейшее понижение энергии достигается, если всем атомам предоставить свободу независимо смещаться (атомная релаксация). Расположение атомов, отвечающее минимуму  $U$ , определяет искомую равновесную атомную структуру границы.

Почти во всех выполненных до сих пор расчетах  $U$  пользовались приближением парного взаимодействия атомов.

При произвольных сочетаниях  $\theta$  и  $n$  приходится находить расположение всех атомов вблизи поверхности стыка зерен макроскопической протяженности, и такая задача не под силу даже мощным ЭВМ. Она сильно упрощается, если в наложении (1, 2) имеется хотя бы два совпадающих узла. Тогда в силу трансляционной инвариантности в бесконечном наложении будет бесконечно много совпадающих узлов, образующих решетку совпадающих

\*) Расчеты и наблюдения показывают, что искривленные границы состоят фактически из стыкующихся плоских фасеток.

узлов (PCY). При некоторых специальных значениях  $\theta = \theta_{0,i}$  ( $i = 1, 2, 3, \dots$ ) период PCY небольшой, и каждый  $\Sigma$ -й узел — совпадающий. Если к тому же  $\theta$  выбрано так, что плоскость границы совпадает с низкоиндексной плоскостью PCY, граница называется специальной, ее атомная структура периодическая и достаточно определить ее для одного периода. На опыте оказалось, что на кривой зависимости  $U(\theta)$  при заданном низкоиндексном направлении оси поворота имеются резкие провалы при специальных углах  $\theta_{0,i}$ .

Сравнительно небольшие периоды получаются для значений  $\Sigma \leq 25$ . Для таких специальных границ проведено большинство расчетов атомной структуры. В реальных поликристаллах они составляют не более 10% всех границ. Остальные границы называются обычными.

Частным случаем специальных границ являются двойниковые. Короткопериодные (специальные) границы обладают довольно правильной структурой (см. ниже). Она нарушается, когда в границу захватываются дислокации из объема зерен, а также при малых отклонениях  $\theta$  от специальных углов. Эти отклонения осуществляются специфическими линейными дефектами — зернограничными дислокациями (ЗГД), примером которых являются двойнирующие дислокации.

Расчеты на ЭВМ выполнены пока только для некоторых специальных границ наклона и кручения в кубических бикристаллах. Они производятся обычно по следующей схеме. В центральном сечении  $z = 0$  прямоугольной расчетной ячейки располагается плоскость границы, проходящая через совпадающие узлы. Размеры ячейки по осям  $x$  и  $y$  равны периодам повторяемости PCY  $l_1$  и  $l_2$ , и на границах ячейки задаются периодические граничные условия. Размер  $l_3$  ячейки по оси  $z$  также порядка периода PCY. В исходном положении все атомы фиксируются в соответствующих узлах наложения (1,2) и вычисляется энергия такой структуры  $U^0$ . Затем проводится жесткая релаксация. При этом одна половина бикристалла ( $z > 0$ ) смещается как жесткое образование относительно другой ( $z \leq 0$ ) на такое  $r = r_1$ , при котором энергия системы станет минимальной ( $U^1$ ). Для этого варьируют  $r_x$ ,  $r_y$  в пределах  $l_1$  и  $l_2$  (при этом совпадающие узлы, как легко проверить путем взаимного смещения нарисованных на кальке решеток 1 и 2, переходят с границы в объем кристаллов), а  $r_z$  не превосходит нескольких десятых межатомного расстояния (в противном случае в плоскости границы образуется зазор и  $U$  сильно возрастает). После этого фиксируют положения атомов на и вблизи границ  $\pm \frac{1}{2} l_3$  расчетной ячейки и дают остальным атомам релаксировать, пока не будет достигнут абсолютный минимум энергии  $U^2$ . Последовательность этапов нахождения энергии  $U^2$  несколько иная в случае обычных границ<sup>136</sup>.

Поскольку не доказано, что найденный минимум действительно абсолютный, следует проверить, является ли полученный на этапе жесткой релаксации минимум  $U^1$  единственным, и если нет, провести атомную релаксацию конфигураций, отвечающих другим минимумам  $U^1$  и из набора полученных значений  $U_2^{(1)}$ ,  $U_2^{(2)}$ ,  $U_2^{(3)}$ , ... выбрать наименьшее. Структуры, отвечающие другим минимумам, можно рассматривать как зернограничные дефекты упаковки.

Полученные до 1978 г. включительно результаты машинного моделирования границ отражены в гл. V книги<sup>135</sup>. Они подтвердили существование провалов на кривых  $U(\theta)$  и позволили обнаружить похожие структурные элементы на границах с различными значениями  $\theta$ . Расчеты<sup>137</sup> для ГЦК-кристаллов и анализ<sup>138</sup> предшествующих работ показали, что эти структурные элементы представляют собой сочетания полиэдров Вороного, в состав которых входят группы плотно упакованных атомов (тетраэдры, октаэдры, тригональные призмы), разделенные более рыхлыми прослойками, но без междоузлий, способных вместить лишний атом (компактные полиэдры<sup>139</sup>). Так, на рис. 26 показана симметричная граница наклона  $[100] \Sigma = 5$  в Al,

в которой выделены пятиугольные бипирамиды и треугольные призмы с насадками. Результаты систематического расчета 50 различных специальных границ наклона [100], [110] и [111] в ГЦК-кристаллах с указанием избыточного объема границы и порядка расположения полиэдров приведены в <sup>140</sup>.

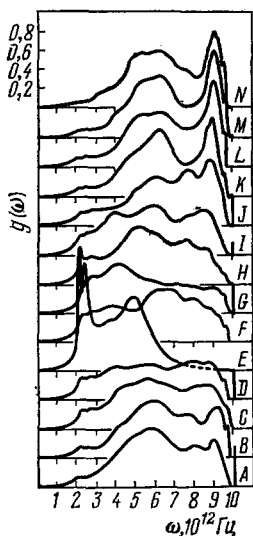
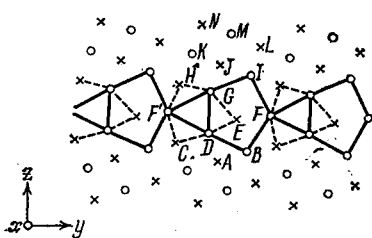


Рис. 26. Структура границы наклона [100]  $\Sigma = 5$  в алюминии (сверху) и плотность колебательных уровней различных атомов в ней <sup>148</sup>.

Компактные полиэдры образуются, как правило, уже на стадии жесткой релаксации (так что на границе нет совпадающих узлов), а не при атомной релаксации.

В границах наклона [100] и [110] в ОЦК-решетке, рассчитанных с разными потенциалами <sup>139</sup>, обнаруживаются трехгранные призмы с насадками и пятиугольные бипирамиды. ОЦК-решетка имеет более рыхлую структуру, чем ГЦК-решетка. Чтобы она была устойчивой с центральным потенциалом, необходимо учитывать взаимодействия в двух координационных сферах, которые вместе содержат 14 «ближайших» соседей. Это приводит к тому, что границы наклона в ОЦК-металлах хотя и состоят тоже из компактных полиэдров, но упаковка атомов в них менее плотная, чем в ГЦК-металлах, а при нахождении позиций атомов стадия атомной релаксации играет не меньшую роль, чем жесткие сдвиги <sup>141</sup>. Это приводит к более симметричной структуре границы, и совпадающие узлы встречаются в ней чаще, чем в ГЦК-кристаллах.

Структуру границ наклона с углами, промежуточными между двумя специальными, просчитал Николс <sup>142</sup> и нашел, что в них с изменением  $\theta$  постепенно изменяется поверхностная концентрация полиэдров разных сортов.

Расчеты структуры границ кручения <sup>143</sup>, <sup>144</sup> принципиальных отличий от границ наклона не выявили.

В единственной пока работе по ГПУ-кристаллам <sup>145</sup> исследовалась структура и спектр колебаний атомов (см. ниже) в границе наклона [0001]  $\Sigma = 7$  (1320) в  $\alpha$ -Ti с 6-12 потенциалом Леннард-Джонса. Релаксированная структура границы представлена на рис. 27. Период повторяемости содержит две деформированные треугольные призмы с двумя полуконтаэдрическими боковыми насадками (ABCD'EC'FB) и 4 деформированных тетраэдра AD'F'C и ACED. На кривых плотности состояний  $g(\omega)$ , аналогичных представленным на рис. 26, атомы A и D имеют низкочастотные резонансные моды.

Рассмотренные расчеты касались структуры границ при температуре 0 К. Для вычисления частот тепловых колебаний, которые определяют колебательную энтропию границы, Прован и Бамиро <sup>146</sup> использовали эйнштейновскую модель, согласно которой каждый атом колеблется независимо от других с частотой  $\omega_E$  в потенциальной яме, образованной окружающими соседями, которые считаются неподвижными.  $\omega_E$  определяется выбранным межатомным потенциалом. Более строгие методы вычисления локальной плотности колебательных состояний каждого атома расчетной ячейки следующие: 1) диагонализация динамической матрицы для всех атомов расчетной ячейки, 2) анализ колебаний в модели молекулярной динамики и 3) рекурсивный метод <sup>147</sup>, сводящийся к вычислению коэффициентов в представлении гриновской функции системы в виде бесконечной дроби. Последний

метод требует наименьшего машинного времени. Его использовали Хашимото с сотр.<sup>148</sup> для расчета колебательных спектров атомов (локальной плотности состояний  $g(\omega)$ ) границ наклона [001]  $\Sigma = 5$  и  $\Sigma = 11$  (2 различные конфигурации с немного различающимися энергиями  $U$ ) в Al с потенциалом Морза. Результаты для границы  $\Sigma = 5$  с меньшей энергией представлены на рис. 26. Видно, что атом E в вершине пятиугольной бипирамиды, дальше остальных отстоящий от соседних, имеет низкую собственную частоту, которая, как показывает расчет, вызывает сильное увеличение энтропии  $S$  и заметно снижает свободную энергию конфигурации  $F = U - TS$ .

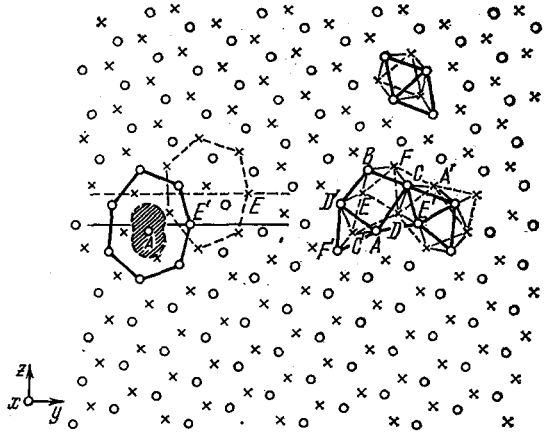


Рис. 27. Симметричная граница наклона [0001]  $\Sigma = 7$  в  $\alpha$ -титане (ГПУ)<sup>145</sup>. Круги и крестики — атомы в соседних плоскостях (0001). Заптрихованная область вокруг атома А — 10-кратно увеличенная амплитуда его колебаний при 300 К. Сверху показаны сочетания октаэдров и тетраэдров в бездефектной ГПУ-решетке (см. текст).

Динамическое моделирование тепловых колебаний позволяет исследовать формирование структуры границы при затвердевании расплава<sup>149</sup>. Из-за ограничений машинного времени расчеты проводились пока только для двухмерной модели по следующей схеме (некоторые детали опускаем). На противоположных прямых краях рабочей ячейки задается расположение атомов в зернах 1 и 2, разориентированных на заданный угол  $\theta$ . Зазор между зернами заполняется жидкостью, т. е. атомами, средняя кинетическая энергия которых превышает  $kT_{пл}$ . «Давление» регулируется заданием ширины зазора. Температура жидкости  $T$  и давление  $p$  понижаются по заданному режиму, жидкость затвердевает, причем релаксация зернограничной прослойки происходит не при 0 К, как при статических расчетах. В<sup>149</sup> рассматривался участок симметричной границы  $\Sigma = 21$  [111], содержащий 400 атомов, в течение 6000 временных шагов  $\Delta t$  ( $6000\Delta t = 10^{-10}$  с). Структура формирующейся границы зависит не только от мгновенных значений  $T, p$ , но и от предшествующего режима изменения  $T, p$ . Однако, за  $\sim 50 \Delta t$  устанавливаются их равновесные значения. Повышение  $T$  приводит к увеличению ширины и рыхлости границы, повышение  $p$  при конечных  $T$  дает более компактную структуру. Хотя границы зерен 1 и 2 всегда задавались прямыми, при всех исследованных режимах  $T(t), p(t)$  граница не получалась прямой. Это свидетельствует о ее легкой подвижности как в момент затвердевания, так и при последующей выдержке при повышенной температуре. С другой стороны, четкие микрофасетки также не наблюдались.

Машинное моделирование может быть использовано также при исследовании структуры межфазных границ. Например, в кристаллографии фазовых превращений в стали важна структура поверхности раздела ГЦК ( $\gamma$ )- и ОЦК ( $\alpha$ )-решеток и выяснение условий, при которых имеется ориентационное соответствие по Курдюмову — Заксу (КЗ)  $\{110\}_\alpha \parallel \{111\}_\gamma, \{1\bar{1}1\}_\alpha \times \{111\}_\gamma$  или по Нишияма — Вассерману (НВ)  $\{110\}_\alpha \parallel \{111\}_\gamma, \langle 001 \rangle_\alpha \times \langle 011 \rangle_\gamma$ . Полная аккомодация решеток на границе фаз может быть достигнута введением на границу раздела одного или нескольких семейств дисло-

каций несоответствия и параллельных уступов одноатомной или большей высоты. До сих пор вычислены лишь параметры указанных семейств линейных дефектов в зависимости от отношения параметров решеток  $a_\alpha$  и  $a_\gamma$  и от угла  $\psi$  поворота  $\alpha$ -решетки относительно  $\gamma$ -решетки вокруг направления  $[111]_\gamma$ . Если для соотношения НВ принять  $\psi = 0$ , то для КЗ  $\psi = \pm 5,26^\circ$ <sup>150</sup>. Отсутствуют расчеты атомной структуры как ядер дислокаций несоответствия и уступов, так и границы при произвольных значениях  $\psi$  и  $n$ , которые должны подтвердить, действительно ли модель границы<sup>150</sup> отвечает минимуму свободной энергии.

## 6. ДЕФЕКТЫ В СТРУКТУРЕ АМОРФНЫХ МЕТАЛЛОВ

Новый объект машинного моделирования составляют аморфные металлы. Их исследования основаны на построении моделей структур случайно расположенных плотно упакованных шаров<sup>151</sup>. Задают размер расчетной ячейки, периодические граничные условия и методом розыгрыша случайных чисел находят расположения центров твердых сфер заданного радиуса. Заполнение расчетной ячейки ведут до тех пор, пока не останутся участки, в которые можно вписать сферы, не перекрывающиеся с соседними. После этого задают потенциал межатомного взаимодействия  $\varphi_{ij}(r)$  и проводят релаксацию, т. е. находят смещения атомов, отвечающие минимуму энергии системы  $E$  при данном объеме  $V$ . Вычисляют давление  $p$  на граничные атомы и изменяют объем  $V$ , смещая граничные атомы, пока при  $V = V_0$  и  $p = 0$  энергия  $E$  не достигнет минимума.

Для извлечения информации о макроскопических свойствах полученных структур необходим их статистический анализ. До недавнего времени при этом ограничивались нахождением радиальной функции распределений межатомных расстояний и ее сопоставлением с экспериментальными данными. Разумеется, массив координат всех атомов в расчетной ячейке содержит гораздо больше информации. Для ее описания авторы<sup>152, 153</sup> предложили рассматривать тензор локальных напряжений (atomic level stresses) в месте нахождения атома  $i$ :

$$\sigma^{\alpha\beta}(i) = \frac{1}{2\Omega_0} \sum_{j \neq i} \frac{d\varphi(r_{ij})}{dr_{ij}} \frac{r_{ij}^{\alpha,\beta}}{r_{ij}}; \quad (34)$$

здесь  $r_{ij}$  — расстояние между атомом  $i$  и его соседом  $j$ ;  $\Omega_0$  — объем полиэдра Вигнера — Зейца, описанного вокруг атома  $i$ . Вторая характеристика структуры — коэффициенты симметрии окружения атома  $i$ :  $\epsilon_n^{l,m}(i)$ , входящие в разложение по сферическим гармоникам  $Y_l^m(\theta_i, \varphi_i)$  выражения для изменения энергии  $\Delta E_i$  атома  $i$  при его смещении на  $\Delta r_i$  при фиксированных соседних атомах:

$$\Delta E(i) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial^n E}{\partial r_i^n} \frac{|\Delta r_i|^n}{n!}, \quad (35)$$

где в состоянии равновесия

$$\left. \frac{\partial^n E}{\partial r_i^n} \right|_{eq} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \epsilon_n^{l,m}(i) Y_l^m(\theta_i, \varphi_i).$$

Наибольший интерес представляют инварианты  $\alpha_0 = \epsilon_2^{0,0}$  (имеющие смысл модуля сжатия) и

$$\beta = \frac{1}{\alpha_0} \sqrt{\sum_{m=-2}^2 |\epsilon_2^{2,m}|^2} \quad (36)$$

— мера отклонения симметрии окружения атома от сферической. Расчеты<sup>153</sup>



проводились с потенциалом  $\varphi_{ij}$  для железа. Для каждого атома вычислены  $\alpha_0$ ,  $\beta$ , а также инварианты тензора  $\sigma^{\alpha\beta}$ , в частности, давление  $p = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha\alpha}$  и инвариант Мизеса

$$\tau = \left\{ \frac{1}{3} \left[ \frac{1}{2} (\sigma_1 - \sigma_2)^2 + \frac{1}{2} (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + \dots + \frac{1}{2} (\sigma_3 - \sigma_1)^2 \right] \right\}^{1/2}.$$

В зависимости от численных значений каждого из  $k$  инвариантов все атомы разбиты на  $4k$  групп. Группы с предельно малыми и предельно большими значениями содержат по 21% всех атомов. Между значениями разных инвариантов на данном атоме имеются корреляции. Оказалось, что атомы предельных групп объединены в кластеры по 10–20 атомов, которые можно

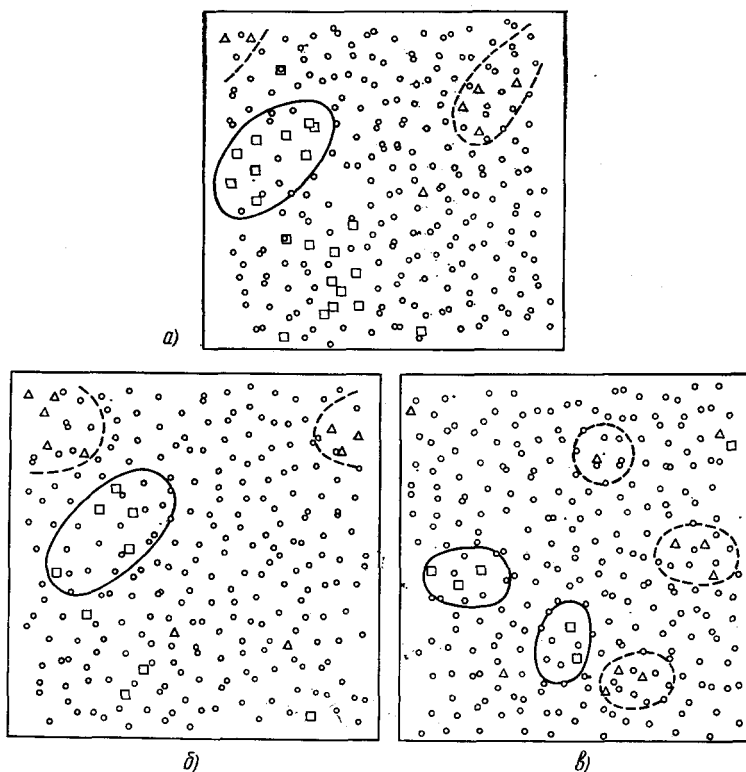


Рис. 28. Три соседних слоя (а — в) толщиной 0,37 нм с перекрытием 0,057 нм, параллельных плоскости сдвига, в расчетной ячейке аморфного железа. Квадраты — центральные атомы п-дефектов, треугольники — р-дефектов. Крупные п-дефекты обведены сплошной линией, крупные р-дефекты — штриховой <sup>183</sup>.

рассматривать как дефекты аморфной структуры. Дефекты с низкой плотностью  $\rho$  (на  $\sim 10\%$  ниже средней  $\rho$  — места растяжения, называемые дефектами п-типа) — аналоги вакансий в кристаллах, но более размазанные. Дефекты с плотностью на  $10\%$  выше  $\rho$  (сжатие, дефекты р-типа) — аналоги межузельных атомов. п- и р-дефектов почти одинаковое число. Они часто встречаются парами (рис. 28). Как и для пар Френкеля, возможна взаимная аннигиляция п- и р-дефектов. Моделирование отжига аморфного металла позволило воспроизвести связанные с аннигиляцией изменения радиальной функции распределения атомов, наблюдаемые на опыте <sup>184</sup>.

Атомы в дефектах с экстремальными значениями  $\tau$  имеют большие значения  $\beta$ . В этих местах под приложенным касательным напряжением зарождаются пластические сдвиги. Динамика сдвигообразования исследована

в расчетной ячейке из 2067 атомов с периодическими условиями на границах, где задавалась деформация сдвига  $\gamma^{155}$ . Она увеличивалась шагами  $\Delta\gamma = 0,1-0,2\%$ , на каждом шаге проводилась атомная релаксация, определялись смещения атомов  $\Delta u_\alpha(i)$ , деформация  $\Delta \varepsilon^{\alpha\beta}(i)$  и изменения энергии  $\Delta E(i) =$

$$= \sum_{\alpha, \beta} \sigma^{\alpha\beta} \Delta \varepsilon^{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \xi} C^{\alpha\beta\gamma\xi} \Delta \varepsilon^{\alpha\beta} \Delta \varepsilon^{\gamma\xi}.$$

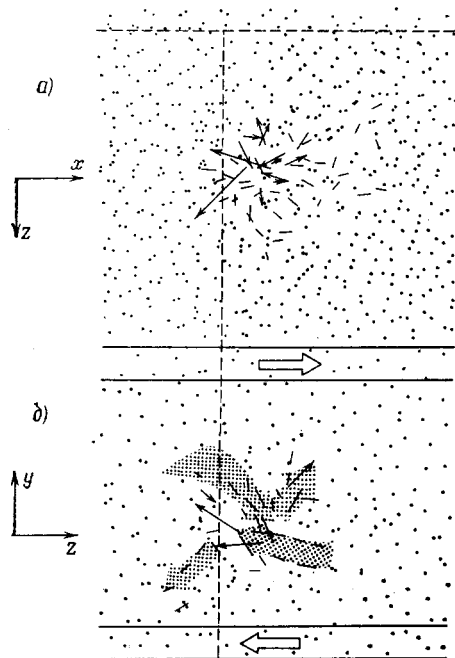


Рис. 29. Смещения атомов при деформации сдвига  $\gamma^{155}$ . Широкие стрелки указывают средние смещения.

Локальные константы упругости  $C^{\alpha\beta\gamma\xi}$  вычисляются аналогично (34). На кривых  $\Delta E - \gamma$  наблюдаются срывы, сопровождающиеся средними смещениями атомов в  $\tau$ -дефектах на расстояниях порядка межатомного, направленными так, что упругая энергия сдвига релаксирует (рис. 29). Необратимая деформация локализована в участках размера  $\sim 4a$ . Имеются корреляции между  $\Delta u$ ,  $p$ , сдвиговыми напряжениями  $\sigma_{xy}$ , модулями упругости  $C^{\beta\gamma\xi}$  и распределением полиэдров Вороного  $^{156}$ .

При моделировании самодиффузии в аморфном металле  $^{157}$  из него удаляется атом и определяются высоты потенциальных барьеров, препятствующих перескоку каждого из окружающих атомов в образовавшуюся вакансию. Высоты этих барьеров имеют значительный разброс.

Рассмотренные выше результаты показывают, что понятие локализованного дефекта структуры применимо не только к кристаллам, но и к аморфным телам. Поэтому можно говорить о дефектах в твердых телах вообще.

## 7. ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МАШИННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КОНФИГУРАЦИЙ ДЕФЕКТОВ

Перечислим кратко основные направления, в которых в ближайшее десятилетие можно ожидать существенных новых результатов.

1. Моделирование дефектных структур в системах, состоящих из атомов нескольких сортов (твердые растворы с учетом концентрационных неоднородностей и процессов упорядочения и распада, интерметаллиды, аморфные металлы и сплавы), и реакций взаимодействия и перестроек различных дефектов в таких системах.

2. Моделирование поведения дефектных структур под комбинированным воздействием на твердое тело механического напряжения, температуры, облучения быстрыми частицами, электрических и магнитных полей и т. п.

3. Моделирование дефектной структуры приповерхностных слоев твердого тела и внутренних поверхностей раздела (границ зерен в поликристаллах, межфазных границ и эпитаксиальных слоев) и процессов перестройки поверхностных дефектов, в частности, явлений адсорбции и катализа (здесь не рассмотрены)\*).

\* В настоящем обзоре рассматривались только металлы и сплавы. Можно полагать, что в перечисленных трех направлениях пойдет также развитие работ по моделированию дефектов в неметаллических кристаллах и аморфных телах, включая биополимеры.

Что касается ожидаемого развития методов машинного моделирования, то, как видно из приведенных в этом обзоре примеров, благодаря сложному характеру межатомных взаимодействий в твердых телах процесс моделирования на ЭВМ структуры дефектов и ее перестройки становится все менее похожим на решение системы уравнений движения атомов — шариков, соединенных «межатомными связями» — пружинками, которые рвутся, если их чрезмерно натянуть. Результаты моделирования согласуются с экспериментом, только если достаточно полно учтена природа кристалла (или аморфного тела) — сложной квантовомеханической системы атомных остовов и электронов. В то же время строгое полное решение квантовомеханических задач определения структуры даже простых дефектов будет еще долгое время невозможным в силу ограниченных возможностей ЭВМ (и потребует, возможно, разработки иных подходов). Поэтому следует ожидать дальнейшего развития приближенных методов описания межатомных взаимодействий, которые по своей точности будут заметно превосходить существующие.

Несмотря на связанные с этим усложнения расчетов, можно надеяться, что результаты экспериментальных и теоретических исследований структуры дефектов и развитие вычислительной техники позволят в недалеком будущем «проигрывать» на ЭВМ воздействие на заданные дефектные структуры твердого тела механических усилий, температурных полей и т. п. и находить таким способом пути создания новых материалов с заданными сочетаниями свойств.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Агранович В. М., Кирсанов В. В.— УФН, 1976, т. 118, с. 3.
2. Трушин Ю. В., — АЭ, 1976, т. 41, с. 225, 443; 1977, т. 43, с. 71, 509; 1978, т. 45, с. 80; 1978, т. 46, с. 319; 1979, т. 47, с. 443; 1980, т. 48, с. 278, 412; 1980, т. 49, с. 61; 1981, т. 50, с. 71, 239.
3. Nuclear Metallurgy, 1976, v. 20.
4. Орлов А. Н., Трушин Ю. В.— Природа, 1983, № 10, с. 34.
5. Gibson J. V., Goland A. M., Milgram M., Vineyard G. H.— Phys. Rev., 1960, v. 120, p. 1229.
6. Вайнгард Дж.— УФН, 1961, т. 74, с. 435.
7. Alder В. J., Wainwright T. E.— In: Transport Processes in Statistical Mechanics/Ed. by I. Prigogine.— N.Y.: Interscience 1958 — P. 321.
8. Лагарьков А. Н., Сергеев В. М.— УФН, 1978, т. 125, с. 409.
9. Полухин В. А., Ухов В. Ф., Дзугутов М. М., Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов — М.: Наука, 1981.— С. 323.
10. Плишкин Ю. М.— В кн. Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ,— Л.: Наука, 1980 — С. 77.
11. Клименков В. И., Кирсанов В. В., Осипова З. Я.— Кристаллография, 1968, т. 13, с. 1060.
12. Кирсанов В. В., Осипова З. Я. Моделирование структурных дефектов и процессов динамики радиационных повреждений в кристалле с дефектами (сборник программ 3): Препринт НИИ атомных реакторов им. В. И. Ленина П. 147.— Мелекес, 1972.
13. Dahl R. E., Jr., Beeler J. R., Jr., Bourquin R. D.— Computer Phys. Comm., 1971, v. 2, p. 301; перевод в сб. <sup>27</sup>, с. 381.
14. Жуков В. П., Капинос В. Г., Кеворкян Ю. Р., Федоров Г. Б. Исследование динамики кристалла с дефектом на основе машинного моделирования равновесных конфигураций: Препринт ИАЭ.— Москва, 1977.
15. Жетбаева М. П., Кирсанов В. В. Расчет атомных конфигураций и взаимодействий дефектов разных типов в металлах (алгоритм): Препринт ИЯФ КазССР № 3-81.— Алма-Ата, 1981.
16. Агранович В. М., Кирсанов В. В.— ФТТ, 1969, т. 11, с. 674.
17. Johnson R. A.— Phys. Rev. Ser. A, 1964, v. 134, p. 1329.
18. Ганеев Г. З., Ибрагимов Ш. Ш., Кирсанов В. В.— В кн. «Радиационные дефекты в металлических кристаллах».— Алма-Ата, Наука, Каз. ССР, 1978.— С. 47.
19. Johnson R. A., Brown E.— Phys. Rev., 1962, v. 127, p. 446.
20. Kanzaki H.— J. Phys. and Chem. Sol., 1957, v. 2, p. 24, 107.
21. Кривоглаз М. А.— ФММ, 1960, т. 10, с. 169.
22. Кривоглаз М. А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами.— М.: Наука, 1967.
23. Flocken J. W.— Phys. Rev. Ser. B, 1972, v. 6, p. 1176.

24. Esterling D. M.— J. Appl. Phys., 1978, v. 49, p. 3954, 3960.
25. Подчиненов И. Е. Парный потенциал взаимодействия, используемый в машинных моделях.— Деп. в ВИНТИ от 14.05.75 № 1306-75.— С. 26.
26. Stoneham A. M., Taylor R. Handbook of Interatomic Potentials. II. Metals. Report AERE-R10205.— Harwell, 1981.
27. Билер Дж.— В кн. Машинное моделирование при исследовании материалов.— М.: Мир, 1974.— С. 31.
28. Torrens I. M.— Interatomic Potentials.— N.Y.: Academic Press, 1972.
29. Харрисон У.— УФН, 1972, т. 108, с. 285.
30. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложение.— М.: Мир, 1972.
31. Grosens F., Cornelis J., Wallace D. C., Devrese J. T.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1977, v. 81, p. 557.
32. Esterling D. M., Swaroop A.— Ibid., 1979, v. 96, p. 401.  
Swaroop A., Esterling D. M.— Ibid., p. 691.
33. Bullough R., Perrin R. C. Radiation Damage in Reactor Materials.— Vienna: IAEA, 1969.— V. 2, p. 233.
34. Van Heugten W. F. W. M.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1977, v. 82, p. 501; 1978, v. 86, p. 277.
35. Baskes M. I., Melius C. F.— Phys. Rev. Ser. B, 1979, v. 20, p. 3197.
36. De Launey J.— Sol. State Phys., 1956, v. 2, p. 220.
37. Фридель Ж.— В кн. Физика металлов. Ч. I: Электроны.— М.: Мир, 1972.— С. 373.
38. Ducastelle F.— J. de Phys., 1970, t. 31, p. 1055.
39. Gyrot-Lackmann F.— J. Phys. and Chem. Sol., 1968, v. 29, p. 1235.
40. Allen G., Lapoo M.— Ibid., 1976, v. 37, p. 699.
41. Слэтер Дж. Электронная структура молекул.— М.: Мир, 1965.— С. 585.
42. Masuda K., Kobayashi K., Sato A., Mori T.— Phil. Mag. Ser. B, 1981, v. 43, p. 19.
43. Erginsoy C., Vineyard G. H., Englert A.— Phys. Rev. Ser. A, 1964, v. 133, p. 595.
44. Tome C. N., Monti A. M., Savino E. J.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1979, v. 92, p. 323.
45. Schilling W.— J. Nucl. Mater., 1978, v. 69—70, p. 465.
46. Frank W., Seeger A.— Crystal Lattice Defects, 1974, v. 5, p. 141.
47. Young F. W., Jr.— J. Nucl. Mater., 1978, v. 69—70, p. 310.
48. Scholz A., Lehmann C.— Phys. Rev. Ser. B, 1972, v. 6, p. 813.
49. Drittler K., Lahenn H. J., Wollenberger H.— Rad. Eff., 1969, v. 2, p. 51.
50. Beeler J. R.— Phys. Rev., 1966, v. 150, p. 470.
51. Mikhlin E. Ya., Nelaev V. V.— Phys. Stat. Sol. Ser. a, 1976, v. 35, p. K81.
52. Monti A. M., Savino J.— Ibid. Ser. b, 1979, v. 92, p. K39.
53. Mikhlin E. Ya., Nelaev V. V.— Phys. Stat. Sol. Ser. a, 1977, v. 43, p. K23.
54. Vineyard G. H.— Disc. Farad. Soc., 1961, No. 31, p. 7.
55. Ingle K. W., Perrin R. C., Schober H. R.— J. Phys. Ser. F, 1981, v. 11, p. 1161.
56. Жетбаева М. П., Кирсанов В. В., Охрименко Н. С. Моделирование реакций взаимодействия точечных дефектов: Препринт Института ядерной физики АН Каз. ССР № 10-82.— Алма-Ата, 1982.— С. 31.
57. Beeler J. R., Jr.— The Nature of Small Defect Clusters: Report of a Consultant Symposium held at A.E.R.E.— Harwell, 1966: AERE-R5269.— 1966.— V. 1, p. 173.
58. Beeler J. K., Jr.— In: Radiation-induced Voids in Metals: Proceedings of the 1971 Intern. Conference held at Albany, New York, June 9-11, 1971/Ed. by J. W. Corbett, L. C. Ianniello.— U. S. Atomic Energy Commission Office of International Services, 1971.— P. 684.
59. Дохнер Р. Д., Орлов А. Н.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1967, т. 31, с. 851.
60. Плишкин Ю. М., Подчиненов И. Е.— ФММ, 1971, т. 32, с. 254.
61. Суворов А. Л. Атомная структура и параметры изолированных обедненных зон в металлах: Препринт ИТЭФ-145.— Москва, 1980.
62. Bullough R., Euge B. L., Krishan K.— Proc. Roy. Soc. Ser. A, 1975, v. 346, p. 81.
63. Конобеев Ю. В. Радиационные дефекты в металлах.— Л.: АН СССР 1979.— С. 40.
64. Дохнер Р. Д.— ФТТ, 1969, т. 11, с. 1124.
65. Кирсанов В. В.— В кн. Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Физика радиационных повреждений».— Харьков: ХФТИ, 1980.— Вып. 1(12), с. 28.
66. Bullough R., Perrin R. C.— Proc. Roy. Soc. Ser. A, 1968, v. 305, p. 541.
67. Downey M. E., Euge B. L.— Phil. Mag., 1965, v. 11, p. 53.
68. Euge B. L., Bartlett A. F.— Ibid., v. 12, p. 261.
69. Кирсанов В. В., Ласкина Э. И.— Кристаллография, 1976, т. 21, с. 886.
70. Mansel W., Mayer H., Vogl G.— Rad. Eff., 1978, v. 35, p. 69.

71. Dederichs P. H., Lehmann C., Schober H. R., Scholz A., Zeller R.— J. Nucl. Mater., 1978, v. 69-70, p. 179.
72. Kirsanov V. V., Zhetbaeva M. P.— Sol. State Comm., 1979, v. 29, p. 365.
73. Wilson W. D., Johnson R. A.— In: Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects.— N.Y.; Lnd.: Plenum Press, 1972.— P. 375.
74. Жетбаева М. П., Кирсанов В. В., Охрименко Н. С.— ФТТ, 1982, т. 24, с. 2477.
75. Wilson W. D., Bisson C. L., Baskes M. I.— Phys. Rev. Ser. B, 1981, v. 24, p. 5616.
76. Krant A., Dworschak F., Wollenberger H.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1971, v. 44, p. 805.
77. Dworschak F., Lennartz R., Wollenberger H.— J. Phys. Ser. F, 1975, v. 5, p. 400.
78. Dworschak F., Mousan Th., Wollenberger N.— Ibid., 1976, v. 6, p. 2207.
79. Johnson R. A., Lam N. Q.— Phys. Rev. Ser. B, 1976, v. 13, p. 4364.
80. Andermann A., Gehman W. G.— Phys. Stat. Sol., 1968, v. 30, p. 283.
81. De Hosson T. Th. M.— Ibid. Ser. a, 1977, v. 40, p. 293.
82. Wilson W. D., Baskes M. I., Bisson C. L.— Phys. Rev. Ser. B, 1976, v. 13, p. 6.
83. Wilson W. D., Bisson C. L.— Rad. Eff., 1975, v. 25, p. 197.
84. Кирсанов В. В.— Цит. в сб.<sup>10</sup>— С. 115.
85. Орлов А. Н., Трушин Ю. В. Энергии точечных дефектов в металлах.— М.: Энергоатомиздат, 1982.
86. Schober H. R.— J. Phys. Ser. F, 1977, v. 7, p. 1127.
87. Жетбаева М. П., Инденбом В. Л., Кирсанов В. В., Чернов В. М.— Письма ЖТФ, 1979, т. 5, с. 1157.
88. Schilling W.— J. Nucl. Mater., 1978, v. 69-70, p. 465.
89. Жетбаева М. П., Кирсанов В. В.— В кн. Моделирование на ЭВМ дефектов в кристаллах — Л.: ФТИ АН СССР, 1980.— С. 65.
90. Kirsanov V. V., Zhetbaeva M. P.— Sol. State Comm., 1982, v. 42, p. 343.
91. Ingle K. W., Crocker A. G.— Phys. Stat. Sol. Ser a, 1976, v. 38, p. 523.
92. Cotterill R. M. J., Doyama M.— Phys. Rev., 1966, v. 145, p. 465; перевод в кн. Актуальные вопросы теории дислокаций.— М.: Мир, 1968.— С. 135.
93. Norgett M. J., Perrin R. C., Savino E. J.— J. Phys. Ser. F, 1972, v. 2, p. L73.
94. Esterling D. M.— Acta Met., 1980, v. 28, p. 1287.
95. Chang R., Graham L. J.— Phys. Stat. Sol., 1966, v. 18, p. 99; перевод в сб.<sup>92</sup>— С. 169.
96. Gehlen P. C., Rosenfield A. R., Hahn G. T.— J. Appl. Phys., 1968, v. 39, p. 5246.
97. Yamaguchi M., Vitek V.— J. Phys. Ser. F, 1973, v. 3, p. 523, 527; 1975, v. 5, p. 1, 11.
98. De Hosson J. Th. M., Sleeswyk A. W.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1975, v. 72, p. 1975.
99. Johnson R. A., Wilson W. D.— In: Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects/Ed. P. C. Gehlen, J. R. Beeler, R. I. Jaffee— N. Y.: Plenum Press, 1972.— P. 301.
100. Cohen J. B., Hinton R., Lay K., Sass S.— Acta Met., 1962, v. 10, p. 894.
101. Vitek V.— Phil. Mag., 1970, v. 21, p. 1275.
102. Бойко В. С., Гарбер Р. И., Мельников М. В., Петров Н. Н., Соловьев А. В.— ФТТ, 1975, т. 17, с. 534.
103. Beeler J. R.— Phys. Rev. 1966, v. 150, p. 470.
104. Vitek V.— Phil. Mag., 1968, v. 18, p. 773.
105. Gehlen P. C.— J. Appl. Phys., 1970, v. 41, p. 5165.
106. Suzuki H. In: Dislocation Dynamics/Ed. by A. R. Rosenfield, G. T. Hahn, A. L. Bement, Jr., R. I. Jaffee, 1968.— P. 679.
107. Vitek V., Perrin R. C., Bowen D. K.— Phyl. Mag., 1970, v. 21, p. 1049.
108. Takeuchi S.— Ibid. Ser. A, 1979, v. 39, p. 661.
109. Minami F., Kuramoto E., Takeuchi S.— Phys. Stat. Sol. Ser. a., 1972, v. 12, p. 581.
110. Masuda K., Sato A.— J. Phys. Soc. Japan, 1981, v. 50, p. 569.
111. Бойко В. С., Гарбер Р. И., Петров Н. Н., Соловьев А. В.— ФТТ, 1977, т. 19, с. 148.
112. Бойко В. С.— Цит. в<sup>10</sup> сб.— С. 156.
113. Bacon D. J., Martin J. W.— Phil. Mag. Ser. A, 1981, v. 43, p. 883.
114. Minonishi V., Ishioka S., Koiwa M., Morozumi S., Yamaguchi M.— Ibid., p. 1017.
115. Minonishi V., Ishioka S., Koiwa M., Morozumi S., Yamaguchi M.— Ibid., 1982, v. 45, p. 835.

116. Minonishi V., Ishioka S., Koiwa M., Moriguzumi S., Yamaguchi M.— Ibid., 1981, v. 44, p. 1225.
117. Yamaguchi M., Paidar V., Pore D. P., Vitek V.— Ibid., 1982, v. 45, p. 867.
118. Козлов Э. В., Лебедев Ю. Н., Попов Л. Е., Старостенков М. Д.— В кн. Динамика дислокаций.— Киев, 1975.— С. 48.
119. Paidar V., Yamaguchi M., Pore D. P., Vitek V.— Phil. Mag. Ser. A, 1982, v. 45, p. 883.
120. Takeuchi S.— Ibid., 1980, v. 41, p. 541.
121. Yamagata T.— J. Phys. Soc. Japan, 1978, v. 45, p. 1575.
122. Bullough R., Perrin R. C.— Dislocation Dynamics — N.Y.: Mc-Graw-Hill, 1968.— P. 175.
123. Heinisch H. L., Sines G.— Phil. Mag., 1977, v. 36, p. 733.
124. Perrin R. C., Englert A., Bullough R.— Цит. в <sup>73</sup> сб.— P. 509.
125. Schiffgens J. O., Ashton D. H.— J. Appl. Phys., 1974, v. 45, p. 1023.
126. Ingle K. W., Crocker A. G.— Acta Met., 1978, v. 26, p. 1461.
127. Masuda K., Sugano Y., Sato A.— Phil. Mag., 1981, v. 43, p. 869.
128. Bullough R., Newman R. C.— Rept. Prog. Phys., 1970, v. 33, p. 101.
129. Balluffi R. W.— Phys. Stat. Sol., 1970, v. 42, p. 41; перевод в кн. Термически активированные процессы в кристаллах.— М.: Мир, 1973.— С. 42.
130. Журавлев В. А., Фидельман В. Р.— ФММ, 1977, т. 43, с. 222.
131. Фидельман В. Р., Журавлев В. А.— Ibid., 1978, т. 46, с. 106.
132. Miller K. M., Ingle K. W., Crocker A. G.— Acta Met., 1981, v. 29, p. 1599.
133. Плишкин Ю. М., Подчиненова Г. Л., Подчиненов И. Е.— ФММ, 1981, т. 51, с. 349.
134. Плишкин Ю. М.— В кн.: Фазовые превращения и структура металлов и сплавов.— Свердловск: УНЦ СССР, 1982.— С. 77.
135. Орлов А. Н., Перевезенцев В. Н., Рыбин В. В. Границы зерен в металлах.— М.: Metallurgia, 1980.
136. Brokman A., Balluffi R. W.— Acta Met., 1981, v. 29, p. 1703.
137. Pond R. G., Smith D. A.— Ibid., 1979, v. 27, p. 235.
138. Ashby M. P., Spaepen F., Williams S.— Ibid., 1978, v. 26, p. 1647.
139. Vitek V., Smith D. A., Pond R. C.— Phil. Mag., 1980, v. 41, p. 649.
140. Frost H. J., Ashby M. F., Spaepen F.— Scripta Met., 1980, v. 14, p. 1051.
141. Бойко В. С., Кириллов В. А., Орлов А. Н.— Поверхность, 1983, № 2, с. 61.
142. Nichols S.— Scripta Met., 1981, v. 15, p. 423.
143. Bristowe P. D., Crocker A. G.— Phil. Mag., 1975, v. 31, p. 503; 1978, v. 38, p. 487.
144. Sutton A. P.— Ibid. Ser. A, 1982, v. 46, p. 171.
145. Hashimoto M., Ishida Y., Yamamoto R., Dooyama M.— Phys. Stat. Sol. Ser. a, 1981, v. 68, p. 109.
146. Provan J. W., Vamiro O. A.— Acta Met., 1977, v. 25, p. 309; перевод в кн. Атомная структура межзеренных границ.— М.: Мир, 1978.— С. 154.
147. Haydock R., Heine V., Kelly M. J.— J. Phys. Ser. C, 1972, v. 5, p. 2845.
148. Hashimoto M., Ishida Y., Yamamoto R., Dooyama M.— Acta Met., 1981, v. 29, p. 617.
149. Cotterill R. M. J., Leffers T., Lilholt H.— Phil. Mag., 1974, v. 30, p. 265.
150. Rigsbee J. M., Aaronson H. I.— Acta Met., 1979, v. 27, p. 351.
151. Bennett C.— J. Appl. Phys., 1972, v. 43, p. 2727. Ichikawa T.— Phys. Stat. Sol. Ser. a, 1975, v. 29, p. 293.
152. Egami T., Maeda K., Vitek V.— Phil. Mag. Ser. A, 1980, v. 41, p. 883.
153. Srolovitz D., Maeda K., Vitek V., Egami T.— Ibid., 1981, v. A44, p. 847.
154. Egami T.— J. Mater. Sci., 1978, v. 13, p. 2587.
155. Maeda K., Takeuchi S.— Phil. Mag. Ser. A, 1981, v. 44, p. 643.
156. Srolovitz D., Maeda K. et al.— J. Phys. Ser. F, 1981, v. 11, p. 2209.
157. Белашенко Д. К., Фам Кхак Хунг.— Изв. вузов. Сер. «Черная металлургия», 1981, № 5, с. 165.
158. Bauer R., Maysenholder W., Seeger A.— Phys. Lett., 1982, v. 90, p. 55.