

2.2. Влияние изменения плотности твердого тела на диффузионную подвижность атомов (градиент температуры)

Воздействие мощных наносекундных пучков порождает в твердом теле интенсивные термомеханические процессы, в результате которых вещество в течение микро- и даже миллисекунд имеет плотность ρ , отличающуюся от нормальной ρ_0 на единицы и даже десятки процентов (рис. 3). Изменение плотности должно повлечь за собой изменение диффузионных характеристик материала. В этой связи было предпринято изучение поведения коэффициента диффузии жидкого металла в условиях неравновесной

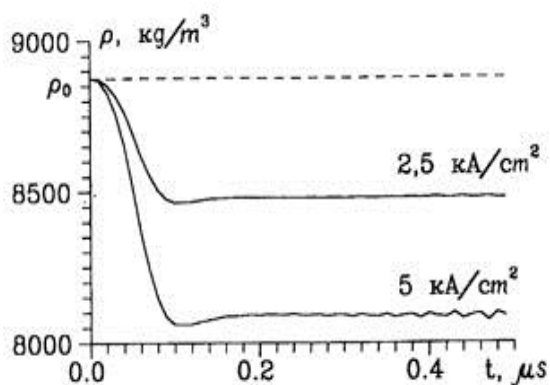


Рис. 3. Эволюция плотности вблизи поверхности медного образца, облучаемого электронным пучком с энергией частиц 0,5 МэВ и длительностью импульса 100 нс при различной плотности тока.

плотности.

Для этого было выполнено молекулярно – динамическое моделирование диффузионных процессов на примере самодиффузии алюминия.

Использовался потенциал межатомного взаимодействия, полученный на основе метода псевдопотенциалов с использованием форм – факторов Хейне – Абаренкова – Анималу. Расчетный кристаллит имел форму куба и состоял из 2048 подвижных атомов. На всех гранях задавались периодические граничные условия. Температурная

зависимость постоянной ГЦК решетки алюминия в диапазоне температур 1000...2500 К определялась выражением:

$$\alpha(T) = \alpha(T_{пл}) \sqrt[3]{1 + \beta(T - T_{пл})} \quad , \quad (19)$$

где $T_{пл} = 934 \text{ К}$ – температура плавления, $\beta = 0,113 \cdot 10^{-3} \text{ К}^{-1}$ – коэффициент объемного расширения. Величина постоянной решетки при температуре плавления $\alpha(T_{пл})$ для используемого потенциала была рассчитана методом искусственного демпфирования и составила 0,42456 нм, что соответствует плотности вещества $\rho_0(T_{пл}) = 2,362 \text{ г/см}^3$. Для задания температуры T каждому атому приписывалась скорость в соответствии с распределением Максвелла. Затем решались уравнения движения атомов до момента установления статистического равновесия между потенциальной и кинетической энергиями системы ($\approx 10^{-13} \text{ с}$). Только после этого начинался расчет диффузионных характеристик.

В процессе моделирования среднеквадратичное смещение атомов рассчитывалось по следующей формуле:

$$\langle R^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\bar{R}_i(t) - \bar{R}_i(0)]^2.$$

Приблизительно через 10^{-12} с зависимость $\langle R^2(t) \rangle$ становится линейной, что позволяет вычислить коэффициент диффузии D по формуле $D = \langle R^2 \rangle / 6t$.

Затем величина α , соответствующая равновесной плотности ($\alpha(T_{nl}) \sim \rho_0$) изменялась, и расчет смещений (а также D) выполнялся для нового значения $\alpha(T_{nl}) \sim \rho$.

Таблица 1. Зависимости предэкспоненциального множителя и энергии активации диффузии от плотности алюминия, рассчитанные на основе данных молекулярно – динамического моделирования.		
ρ / ρ_0	$D_0, \text{см}^2/\text{с}$	$E_0, \text{эВ}$
0,8	$1,36 \cdot 10^{-3}$	0,102
0,9	$1,13 \cdot 10^{-3}$	0,125
1,0	$1,05 \cdot 10^{-3}$	0,180
1,1	$7,76 \cdot 10^{-4}$	0,213

Для проверки модели вычисления производились сначала для равновесной плотности жидкого алюминия. Полученные значения коэффициента самодиффузии жидкого алюминия (см. рис. 4 и таблицу 1) хорошо соответствуют экспериментальным данным, что свидетельствует о корректности разработанной модели.

Затем величина α , соответствующая равновесной плотности ($\alpha(T_{nl}) = \rho_0$) изменялась, и расчет смещений (а также D) выполнялся для нового значения $\alpha(T_{nl}) = \rho$.

Результаты вычисления коэффициента диффузии при различных температурах и плотностях алюминия приведены на рис.4.

Звездочками обозначены точки, полученные в результате молекулярно – динамического моделирования, сплошными линиями – полученная с использованием метода наименьших квадратов аппроксимация выражением Аррениуса:

$$D(T) = D_0 \exp(-E_a / kT), \quad (20)$$

где D_0 - предэкспоненциальный множитель, E_a - энергия активации диффузии, k - постоянная Больцмана.

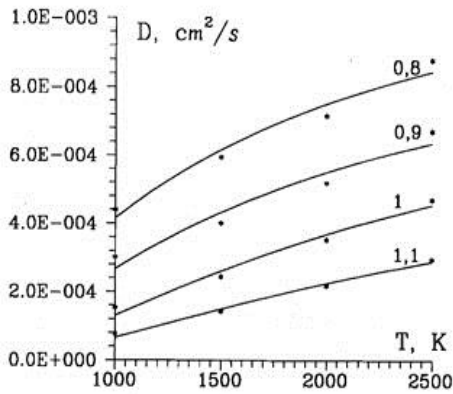


Рис. 4. Рассчитанные методом молекулярной динамики зависимости коэффициента самодиффузии жидкого алюминия от температуры и плотности.

Процедура расчета энергии активации диффузии и предэкспоненциального множителя такова. Для нескольких значений температур T моделированием по методу молекулярной динамики определяем значения коэффициента диффузии D . Предполагаем, что наша зависимость коэффициента самодиффузии от температуры аппроксимируется выражением Аррениуса (20).

Подставляя в (20) значения коэффициента диффузии D и соответствующие значения температур и используя метод наименьших квадратов, находим расчетным путем значения энергии активации E_a и значения предэкспоненциального множителя D_0 , соответствующие заданной плотности исследуемого вещества.

Таким образом, результаты свидетельствуют о том, что уменьшение плотности облучаемого образца в результате термомеханических процессов приводит к существенному усилению диффузионной подвижности атомов, главным образом за счет уменьшения энергии активации диффузии. Поскольку вещество на поверхности в течение микро – и миллисекунд находится в разряженном состоянии, рассмотренный механизм дает ощутимый вклад в усиление диффузионного и термодиффузионного потоков, пропорциональных значению коэффициента диффузии.