

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 5, Number 297 (2014), 12 – 15

THE METHOD OF CALCULATION OF THE MIGRATION ENERGY OF VACANCIES IN CUBIC CRYSTALS

K. Baigisova

Kazakh national technical university named after K. I. Satpayev, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: kymbat_b@mail.ru, baigisova.k@gmail.com

Key words: migration energy, vacancy, configuration sphere, fcc crystal.

Abstract. We propose a method of simulation of vacancy migration energy in fcc (face-centered-cubic) metals. The method is based on the fact that the atoms in crystal are distributed on configuration spheres, surrounding one atom, which was chosen as the central atom. The vacancy migration energy is found from the difference between the crystal energies with two vacancies and one interstitial atom at the saddle point in a certain configuration sphere, and with one vacancy in the same configuration sphere.

УДК 538.9

КУБТЫҚ КРИСТАЛДАРДАҒЫ ВАКАНСИЯЛАРДЫҢ МИГРАЦИЯ ЭНЕРГИЯСЫН ЕСЕПТЕУ ӘДІСТЕРІ

Қ. Байгісова

Қ. И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық университеті, Алматы, Қазақстан

Тірек сөздер: миграция энергиясы, вакансия, конфигурациялық сфера, қабырғаға центрленген кубтық кристал.

Аннотация. Қабырғаға центрленген кубтық кристалдардағы вакансиялардың миграция энергиясын есептеудің қарапайым әдісі ұсынылып отыр. Әдістің негізі мынада: кристалдардағы атомдар белгіленген бір орталық атомның айналасын қоршаған конфигурациялық сфераларда орналасқан. Белгілі бір конфигурациялық сферадағы «ер нүктесіндегі» бір түйінаралық атом және екі вакансиядан тұратын кристал энергиясы мен сол конфигурациялық сферада бір вакансияға ие кристал энергиясының айырмасынан вакансиялардың миграция энергиясы анықталынады.

Металдардағы нүктелік ақаулардың миграция энергиясын анықтауға арналған жұмыстарды сараптау нәтижесі тәжірибелік, теориялық және есептеу әдістері арқылы алынған энергия мәндері әр алуан екенін көрсетеді. Мысалы, мыстағы вакансиялардың миграция энергиясының тәжірибелік мәндері 0.6 – 1.08 эВ аралығында, ал есептік мәндері 0.34 – 1.0 эВ аралығында [1-3].

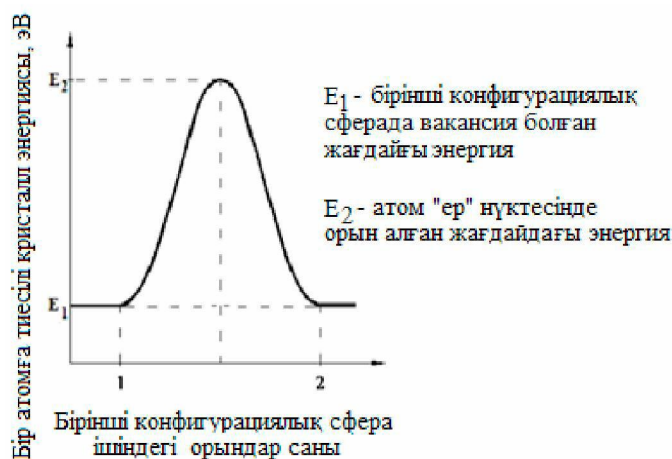
Сондықтан қатты денелердегі нүктелік ақаулардың миграция энергиясын анықтайтын тәжірибелік және есептік әдістерді жетілдіру өзекті мәселе болып табылады.

Қабырғаға центрленген кубтық кристалдардағы вакансиялардың миграция энергиясын есептеудің қарапайым әдісі ұсынылып отыр, ол келесі жолмен іске асырылады: N атомнан тұратын модельді кристалл конфигурациялық сфераларға бөлінеді. Ол үшін бір атомды орталық атом деп таңдаймыз. Орталық атомға ең жақын атомдар бірінші конфигурациялық сфера түзеді. Орталық атомнан бірдей қашықтықта орналасқан келесі атомдар екінші конфигурациялық сфера түзеді. Бұл процесс модельді кристалдағы конфигурациялық сфераларға атомдардың барлығы орналастырылғанша жалғаса береді. Бұл жердегі i -ші конфигурациялық сфераның радиусы

$$R_i = a\sqrt{m_i^2 + n_i^2 + l_i^2},$$

мұндағы m_i, n_i, l_i – i -ші конфигурациялық сферада орналасқан атомдардың кристаллографиялық индекстері; a – кристалдық тор параметрі.

Мысалы, қабырғаға центрленген кубтық тордан тұратын кристалдардағы бірінші конфигурациялық сфераның радиусы $R_1 = a\sqrt{\frac{1}{2}}$ және ол 12 атомнан тұрады, екінші конфигурациялық сфераның радиусы $R_2 = a$, ол 6 атомнан тұрады және т.с.с. Ары қарай бірінші конфигурациялық сферада бір атом болмаған жағдайда, яғни бұл сферада бір вакансия бар деп алып, кристалдағы барлық атомдардың өзара әсерлесу энергиясы есептелінеді. Содан кейін екінші конфигурациялық сферада вакансия болған жағдайда атомдардың өзара әсерлесу энергиясы есептелінеді және т.с.с.



1-сурет – Бірінші конфигурациялық сферада екі вакансия және атом «ер» нүктесінде тұрған кездегі кристалдың энергиясы

Кристалдағы атомдардың өзара әсерлесу энергиясының бір вакансияға ие конфигурациялық сфера нөміріне тәуелділік графигі салынады.

Айталық, i -ші конфигурациялық сферада вакансия болған жағдайда кристалдағы атомдардың өзара әсерлесу энергиясы едәуір төмендейді деп қарастырайық. Бұл вакансияның сфера ішінде қозғалатынын көрсетеді, өйткені вакансия басқа басқа конфигурациялық сфераға өткенде кристал энергиясын өсіреді. i -ші конфигурациялық сферада вакансия болғандағы атомдардың өзара әсерлесу энергиясын E_{i1} деп белгілейік.

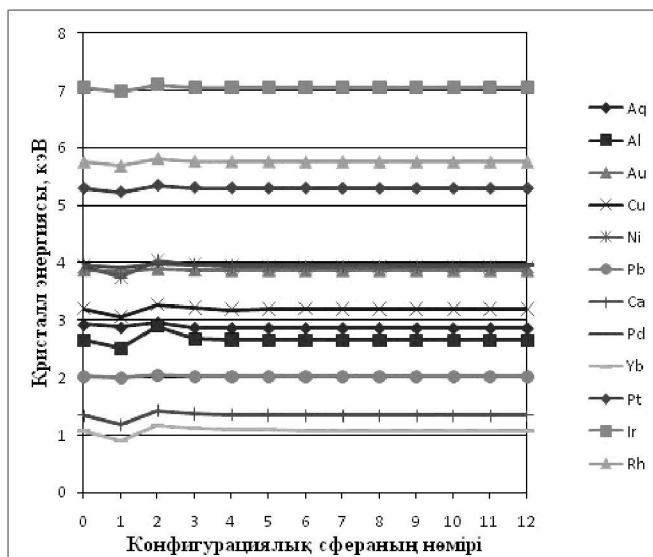
Бұл сфераның ішіндегі вакансия миграциясы, вакансияға жақынырақ орналасқан атом түйін арасына өткенде, яғни i -ші және $i-1$ -ші конфигурациялық сфералар арасында болғанда басталады (мысалы, $i=1$ болғанда бірінші конфигурациялық сфера мен орталық атом арасында). Бұл жағдайда кристалда i -ші конфигурациялық сферада екі вакансия және бір түйінаралық атом болады. Сондықтан i -ші және $i-1$ -ші конфигурациялық сфералар арасында екі вакансия және бір түйінаралық атом болған кездегі атомдардың өзара әсерлесу энергиясы, яғни E_{i2} есептелінеді. Онда кубтық кристалдағы вакансиялардың миграция энергиясы келесі қарапайым формуламен анықталады:

$$E_m^v = E_{i2} - E_{i1} \quad (1)$$

1-сурет (1)-ші формуланың физикалық мәнін сипаттайды.

2-суретте қабырғаға центрленген кубтық кристалдан тұратын металдардағы атомдардың өзара әсерлесу энергиясының бір вакансиядан тұратын конфигурациялық сфераның нөміріне тәуелділік графигі берілген.

Атомдардың өзара әсерлесу энергиясын есептеу үшін көбінесе қолданыста жүрген Морзе потенциалы алынды [4-7]. Орталық атомның айналасындағы 30 конфигурациялық сфераларда орналасқан, сол орталық атомнан және 1060 атомнан тұратын қабырғаға центрленген кубтық кристал моделі үшін Морзе потенциалының параметрлері есептелінді.



2-сурет – Кристалл энергиясының бір вакансиядан тұратын 12 конфигурациялық сфераға тәуелділік графигі

Барлық қабырғаға центрленген кубтық кристалдар үшін вакансия бірінші конфигурациялық сферада болған кезде атомдардың өзара әсерлесуі минимумге ие екенін 2-суреттен көруге болады.

Кестеде ұсынылып отырған әдіс арқылы есептелінген қабырғаға центрленген кубтық кристалдан тұратын металдардағы вакансиялардың миграция энергиясының мәндері берілген.

Берілген әдісті кубтық кристалдардағы вакансиялардың миграция энергиясын есептеу үшін қолдануға болатынын есептелген мәндердің тәжірибе нәтижелерімен сәйкестігі дәлелдейді.

Қабырғаға центрленген кубтық кристалдан тұратын металдардағы вакансиялардың миграция энергиясының есептелген мәндері

Металл	Берілген әдіс бойынша есептелген мәндер, E_m^v , эВ	Есептелген мәндер, E_m^v , эВ (басқа авторлар)	Тәжірибелік мәндер, E_m^v , эВ [1]		
			Өздік диффузия әдісі	Суару	Суару және сәулелендіру
Ag	0.65	0.88; 0.90 [1] 1.03 [3]	–	0.66	0.67
Al	1.17	0.66 [3] 0.775; 0.96 [1]	0.62	0.62-0.66	0.58-0.62
Au	0.59	0.965; 1.13 [1] 1.71 [3]	0.85	0.83	0.77-0.85
Ca	1.02	–	–	–	–
Cu	1.19	0.77-1.00 [1]	0.77-0.88	0.71-1.08	0.67-0.72
Ir	1.13	–	–	–	–
Ni	1.07	1.04-1.25 [1]	–	1.27	–
Pb	0.41	0.44-0.61 [1] 0.76 [3]	0.60	–	0.54
Pd	1.42	1.21 [1]	–	–	–
Pt	1.35	1.48; 2.25 [1] 2.45 [3]	–	1.43	1.36-1.46
Rh	1.13	–	–	–	–
Yb	1.03	–	–	–	–

Қорытынды. Қабырғаға центрленген кубтық кристалдардағы вакансиялардың миграция энергиясын есептеуге арналған бұл әдіс үш түрлі қарапайым қадамдардан тұрады.

Бірінші қадам – кристадағы атомдар белгіленген бір орталық атомның айналасындағы конфигурациялық сфераларда орналасқан.

Содан кейін бір вакансиялы конфигурациялық сфералар арасынан кристалдың минимал энергиясына ие сфера анықталады.

Белгілі бір конфигурациялық сферадағы «ер» нүктесіндегі бір түйінаралық атом мен екі вакансиядан тұратын кристал энергиясы және сол конфигурациялық сферада бір вакансияға ие кристал энергиясының айырмасынан вакансиялардың миграция энергиясы анықталады.

ӘДЕБИЕТ

- [1] Орлов А.Н., Трушин Ю.В. Энергии точечных дефектов в металлах. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 80 с.
- [2] Siegfried Schmauder, Leon Mishaevsky Jr. Micromechanics and Nanosimulation of Metals and Composites (Advanced Methods and Theoretical Concepts) // Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2009.
- [3] Sato K., Yoshiie T., Xu Q., Kiritani M. Simulation of Vacancy Migration Energy in Cu under High Strain // Materials Science and Engineering. – 15 June 2003. – Vol. 350, Issue 1-2. – P. 220-222. – Symposium on High-Speed Deformation.
- [4] Girifalco L.A., Weizer V.G. Application of Morse potential function to cubic metals // Phys. Rev. – 1959. – Vol. 114. – P. 687-690.
- [5] Wynblatt P. Calculation of the vacancy migration energy in cubic crystals // J. Phys. Chem. Solids. – 1968. – Vol. 29. – P. 215-224.
- [6] Neumann G., Tille V., Hirschwald W. Calculation of vacancy migration energies in cubic metals using generalized Morse functions // Phys. Stat. Sol.(b). – 1972. – Vol. 54. – P. 519-526.
- [7] Плишкин Ю.М., Подчиненов И.Е. Парный потенциал взаимодействия атомов в меди, используемый для расчета характеристик дефектов // ФММ. – 1973. – Т. 36, № 2. – С. 260-264.

REFERENCES

- [1] Orlov A.N., Trushin Yu.V. Energiya tochechnykh defektov v metallakh. M.: Energoatomizdat, 1983. 80 s.
- [2] Siegfried Schmauder, Leon Mishaevsky Jr. Micromechanics and Nanosimulation of Metals and Composites (Advanced Methods and Theoretical Concepts). Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2009.
- [3] Sato K., Yoshiie T., Xu Q., Kiritani M. Simulation of Vacancy Migration Energy in Cu under High Strain. Materials Science and Engineering. 15 June 2003. Vol. 350, Issue 1-2. P. 220-222. Symposium on High-Speed Deformation.
- [4] Girifalco L.A., Weizer V.G. Application of Morse potential function to cubic metals. Phys. Rev. 1959. Vol. 114. P. 687-690.
- [5] Wynblatt P. Calculation of the vacancy migration energy in cubic crystals. J. Phys. Chem. Solids. 1968. Vol. 29. P. 215-224.
- [6] Neumann G., Tille V., Hirschwald W. Calculation of vacancy migration energies in cubic metals using generalized Morse functions. Phys. Stat. Sol.(b). 1972. Vol. 54. P. 519-526.
- [7] Plishkin Yu.E., Podchinenov I.E. Parnyi potentsial vzaimodeistviya atomov v medi, ispolzuemyi dlya rascheta charakteristik defektov. FMM. 1973. T. 36, N 2. S. 260-264.

МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ЭНЕРГИИ МИГРАЦИИ ВАКАНСИЙ В КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

К. Б. Байгисова

Казахский национальный технический университет им. К. И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

Ключевые слова: энергия миграции, вакансия, конфигурационная сфера, ГЦК кристалл.

Аннотация. Предложен метод вычисления энергии миграции вакансий в ГЦК кристаллах. Метод основан на том, что атомы в кристалле распределяются по конфигурационным сферам, окружающим один, выбранный в качестве центрального атома. Энергия миграции вакансий находится из разности энергий кристалла с двумя вакансиями и одним междоузельным атомом в седловой точке в определенной конфигурационной сфере и одной вакансией в той же конфигурационной сфере.

Поступила 01.10.2014 г.