На правах рукописи

Санников Андрей Валерьевич

ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ Ni-Al, Cu-Au, Ni-γFe И ПРОЦЕССОВ, ПРОТЕКАЮЩИХ ВБЛИЗИ НИХ НА АТОМНОМ УРОВНЕ В УСЛОВИЯХ РАЗЛИЧНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Барнаул – 2015

Работа выполнена в ФГБОУ ВПО
«Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Научный руководитель: **Полетаев Геннадий Михайлович,**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Гафнер Юрий Яковлевич,**
доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВПО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова», зав. кафедрой общей и экспериментальной физики;

Рудер Давыд Давыдович,
кандидат физико-математических наук, доцент, ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет», доцент кафедры прикладной физики, электроники и информационной безопасности.

Ведущая организация: ФГБУН «**Институт проблем сверхпластичности металлов РАН**», г. Уфа

Защита состоится «28» мая 2015 г. в 11^{00} часов на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

e-mail: veronika_65@mail.ru

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.
http://www.altstu.ru/structure/unit/odia/scienceevent/2435/

Автореферат разослан «____» апреля 2015 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук Романенко В.В.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организации, просим присылать **в 2-х экз.** на адрес университета и e-mail: veronika_65@mail.ru

РОССИЙСКАЯ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ
БИБЛИОТЕКА
2015

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Границы раздела в металлических материалах (границы зерен, межфазные границы) играют ключевую роль во многих процессах, определяют многие их физические свойства. Особенно это относится к поликристаллам с малым размером зерен, композиционным материалам и механическим смесям с малым размером фаз-компонентов, - в этих случаях относительно высоки доля границ раздела и их влияние на макроскопические свойства материала.

Диффузия в области межфазных границ играет ведущую роль при различных химических реакциях. В случае металлических материалов – это, например, реакция самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), в результате которого получают интерметаллиды, обладающие, как правило, сравнительно высокой термостабильностью и жаростойкостью, что обуславливает их практическую значимость.

Диффузия вблизи границ раздела имеет высокое значение при решении вопросов создания объектов и приборов микроэлектроники и оптоэлектроники. Эти приборы основаны на применении многослойных тонкопленочных структур, а при температурах эксплуатации таких приборов толщина этих структур зачастую сравнима с путем диффузии [1]. Возможность продолжительной эксплуатации приборов микроэлектроники и оптоэлектроники в значительной мере зависит от стабильности их физических свойств и от стабильности образующих их тонкопленочных структур.

В настоящее время остается достаточно много нерешенных вопросов, связанных с атомной структурой межфазных границ и механизмами структурно-энергетических превращений с их участием на атомном уровне, в частности, с механизмами процессов диффузии, деформации, взаимодействия с различными дефектами.

Решение подобных вопросов с помощью реальных экспериментов в настоящее время затруднительно, поскольку для этого необходимы исследования динамики структуры на атомном уровне. В данном случае наиболее эффективным является применение метода компьютерного моделирования, который позволяет с достаточной точностью в рамках модели учитывать и контролировать параметры исследуемого явления, изучать в динамике процессы, протекающие на атомном уровне с использованием различных наглядных визуализаторов структуры. Данный метод является дополнением к известным экспериментальным и теоретическим методам исследования, зачастую выступая в роли связующего звена между ними.

Цель работы заключается в изучении с помощью метода молекулярной динамики атомной структуры межфазных границ Ni-Al, Cu-Au, Ni-γFe и процессов, протекающих вблизи них на атомном уровне в условиях различных внешних воздействий.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что впервые с помощью метода молекулярной динамики проведено исследование атомной структуры и диффузионной проницаемости межфазных границ Ni-Al, Cu-Au, Ni-γFe (100) и (111) при твердофазном контакте. Рассчитаны характеристики диффузии вдоль рассматриваемых границ. Определена роль дислокаций несоответствия в механизмах диффузии и пластической деформации вблизи межфазных границ. Выполнено исследование сорбционной способности рассматриваемых границ по отношению к точечным дефектам. Изучена способность межфазной границы Ni-Al (100) тормозить каскады атом-атомных соударений.

Достоверность результатов обеспечивается применением известных и апробированных методик: метод молекулярной динамики, методика определения параметров потенциалов межатомного взаимодействия.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что полученные результаты могут быть использованы для развития теоретических представлений о границах кристаллических фаз, теории диффузии и процессов с ней связанных вблизи межфазных границ, для создания математических моделей диффузии, учитывающих атомную структуру межфазных границ и механизм диффузии, обнаруженные в настоящей работе. Кроме того, результаты молекулярно-динамических исследований могут быть использованы в качестве демонстрационного материала для студентов физических и материаловедческих специальностей, на их базе возможно создание работ для лабораторного практикума.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Структура сетки дислокаций несоответствия на полукогерентной межфазной границе определяет многие процессы, протекающие вблизи границы: диффузию, деформацию, взаимодействие с другими дефектами и т.д. В частности, миграция атомов в процессе диффузии происходит преимущественно вдоль ядер дислокаций несоответствия.

2. Энергия связи вакансий и межузельных атомов наибольшая с узлами сетки дислокаций несоответствия. Вблизи межфазной границы точечные дефекты стремятся мигрировать в ближайший узел дислокационной сетки.

3. Пластические сдвиги и разрушение кристаллической решетки вблизи межфазной границы инициируются вблизи ядер дислокаций несоответствия. В результате возникновения различных по величине напряжений в контактирующих фазах при одной и той же степени деформации возможна миграция части дислокаций несоответствия с границы в объем одной из фаз.

4. При исследовании взаимодействия каскада атом-атомных соударений с межфазной границей выяснено, что межфазная граница частично поглощает энергию каскада атом-атомных соударений. Степень поглощения энергии каскада межфазной границей повышается с ростом структурного несовершенства границы и плотности дислокаций несоответствия.

Апробация работы. Результаты работы доложены на международных и российских конференциях: VI Сессия Научного совета РАН по механике, Барнаул-Белокуриха (2012); Первая международная конференция «Развитие нанотехнологий: задачи международных и региональных научно-образовательных и научно-производственных центров», Барнаул (2012); Научные чтения им. И.А. Одинга «Механические свойства современных конструкционных материалов», Москва (2012); Всероссийская молодежная научная школа «Актуальные проблемы физики», Таганрог-Ростов-на-Дону (2012); Международная школа-семинар «Ломоносовские чтения на Алтае - 2012», Барнаул (2012); IX Всероссийская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и молодежь - 2012», Барнаул (2012); Первая всероссийская научная конференция молодых ученых с международным участием «Перспективные материалы в технике и строительстве», Томск (2013); IX Всероссийская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и молодежь - 2013», Барнаул (2013); Международная школа-семинар «Ломоносовские чтения на Алтае - 2013», Барнаул (2013); XXII Уральская школа металловедов-термистов «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов», Орск (2014); XII International symposium on explosive production of new materials: science, technology, business and innovations, Cracow, Poland (2014); XIII международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Барнаул (2014); Международная научная конференция молодых ученых «Перспективные материалы в строительстве и технике», Томск (2014).

Публикации. Результаты диссертационной работы опубликованы в 21 научном труде. Число публикаций в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, составляет 11.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 174 наименований. Работа изложена на 125 страницах машинописного текста, содержит 4 таблицы и 33 рисунка.

Работа выполнена в рамках научного проекта №166 программы Министерства образования и науки РФ «Формирование государственных заданий высшим учебным заведениям в части проведения научно-исследовательских работ» и при финансовой поддержке грантов РФФИ №13-02-00301-а, №14-02-98000-р_сибирь_а, №14-08-90416-Укр_а.

Работа выполнена в коллективе научной школы заслуженного деятеля науки РФ, д.ф.-м.н., профессора М.Д.Старостенкова.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

В первой главе диссертации проводится обзор экспериментальных и теоретических данных о структуре границ раздела в металлических материалах: границ зерен и фаз, и их влиянии на свойства материалов. Рассматриваются современные представления о диффузии вдоль границ раздела. В конце первой главы сделана постановка задачи.

На границе фаз может возникнуть ситуация, качественно аналогичная той, которая имеет место на границе кристаллов одной фазы, то есть на границах зерен. В связи с этим в определенных условиях возможно ускорение диффузионного переноса вещества вдоль межфазных границ, что имеет подтверждение в экспериментальной практике [2]. Принципиальное отличие между границами фаз и границами зерен заключается в том, что вторая фаза, как правило, существует в виде изолированного включения в матрице, то есть границы фаз не образуют единой разветвленной сети, подобно границам зерен. Кроме того дислокации, характерные для межфазных границ, образуются не только в результате разориентации контактирующих кристаллов (как в случае границ зерен), но и вследствие несоответствия параметров решеток фаз (так называемые дислокации несоответствия). Из-за несовершенства структуры границы фаз могут обнаруживать высокую диффузионную проницаемость, в некоторых случаях даже более высокую, чем границы зерен [2].

На рис.1 изображен пример электронно-микроскопического изображения атомной структуры полукогерентной межфазной границы InSb–GaAs, взятый из работы [3]. На фотографии отчетливо видны дислокации несоответствия. Данный тип дислокаций (вершинные, по две дислокации, имеющие общее ядро) характерен для сечения (111) ГЦК кристаллов. Например, в [4] говорится, что в сечении (111) подобные «60-градусные» дислокации наблюдаются наиболее часто.

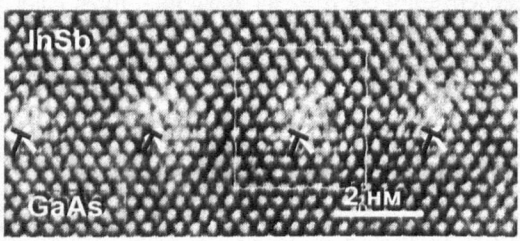


Рис.1. Фотография дислокаций несоответствия на межфазной границе в плоскости (111), полученная с помощью электронного микроскопа. Фотография взята из работы [3].

Вторая глава посвящена проблеме моделирования межфазных границ в металлах. В главе приводится описание метода молекулярной динамики, обосновывается выбор потенциала межатомного взаимодействия, описываются ме-

тодика построения и особенности моделей межфазных границ в металлах, используемых в настоящей работе.

В настоящей работе рассматривались границы Ni-Al, Cu-Au, Ni-γFe. Выбранные ГЦК металлы имеют следующие параметры решеток: Ni – 3,524 Å и Al – 4,05 Å (отличие 14,9%), Cu – 3,615 Å и Au – 4,078 Å (отличие 12,8%), Ni – 3,524 Å и γ-Fe – 3,637 Å (отличие 3,2%) [5]. Отличие параметров решеток приводит к формированию дислокаций несоответствия на межфазной границе: чем выше это отличие, тем, очевидно, выше плотность дислокаций.

Для исследования атомной структуры и процессов, происходящих вблизи рассматриваемых границ в условиях термоактивации и деформации, компьютерное моделирование проводилось с помощью как двумерных, так и трехмерных моделей. Двумерная модель, несмотря на очевидно меньшую достоверность по сравнению с трехмерной моделью, обладает важным преимуществом: размером (можно моделировать гораздо более длинную границу) и наглядностью (визуализация структуры существенно проще).

В трехмерной модели рассматривались ориентации межфазной границы в плоскостях (100) и (111). Межфазная граница создавалась в центре расчетного блока (рис.2). Размеры блока подбирались таким образом, чтобы вдоль межфазной границы можно было использовать периодические граничные условия (размеры границы должны были быть кратны межатомным расстояниям обеих фаз). То есть вдоль осей X и Y на рис.2 имитировалось бесконечное повторение расчетного блока. Вдоль оси Z были наложены жесткие условия, - атомы вблизи границ расчетного блока, параллельных плоскости границы, в процессе компьютерного эксперимента оставались неподвижными. Количество атомов в расчетном блоке составляло около 30000.

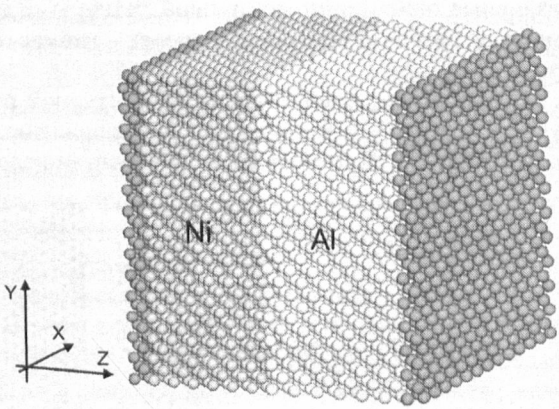


Рис.2. Расчетный блок с межфазной границей Ni-Al (100). Атомы, окрашенные в темно-серый цвет, в процессе компьютерного эксперимента оставались неподвижными.

Для приведения структуры расчетного блока в равновесное состояние (в данных условиях) проводилась структурная релаксация. В результате релаксации температура расчетного блока повышалась, поэтому после ее завершения расчетный блок охлаждался до 0 К. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики в большинстве случаев был равен 5 фс ($5 \cdot 10^{-15}$ с).

При создании межфазной границы разориентация контактирующих кристаллов не производилась, поскольку было выяснено, что, например, для грани-

цы Ni-Al при любой разориентации алюминий вблизи границы стремиться имитировать кристаллическую ориентацию никеля. В результате этого, если Al первоначально был разориентирован относительно Ni, в Al образовывалась граница зерен, параллельная межфазной границе. Данное явление, по всей видимости, обусловлено относительно высокой энергией связи Ni-Al по сравнению со связями Ni-Ni и Al-Al.

Для описания межатомных взаимодействий в настоящей работе использовались парные потенциальные функции Морза:

$$\varphi_{KL}(r) = D_{KL}\beta_{KL}\exp(-\alpha_{KL}r)[\beta_{KL}\exp(-\alpha_{KL}r)-2], \qquad (1)$$

где α_{KL}, β_{KL}, D_{KL} – параметры, определяющие взаимодействие пары атомов сорта K и L; r – расстояние между атомами. Параметры потенциалов Морза были взяты из работы [6].

Третья глава диссертации посвящена исследованию методом молекулярной динамики механизмов диффузии и пластической деформации вблизи межфазных границ Ni-Al, Cu-Au, Ni-Fe в двумерной модели.

При исследовании диффузии вблизи межфазной границы в условиях твердофазного контакта в двумерной модели межфазная граница создавалась посередине расчетного блока, содержащего около 10000 атомов. Рассматривались различные ориентации межфазной границы. Вдоль границы задавались периодические граничные условия, поперек – гибкие, позволяющие расчетному блоку изменять объем.

В процессе первоначальной структурной релаксации при низкой температуре, в ходе которой происходило сопряжение контактирующих фаз, на межфазной границе формировались дислокации несоответсвия (рис.3).

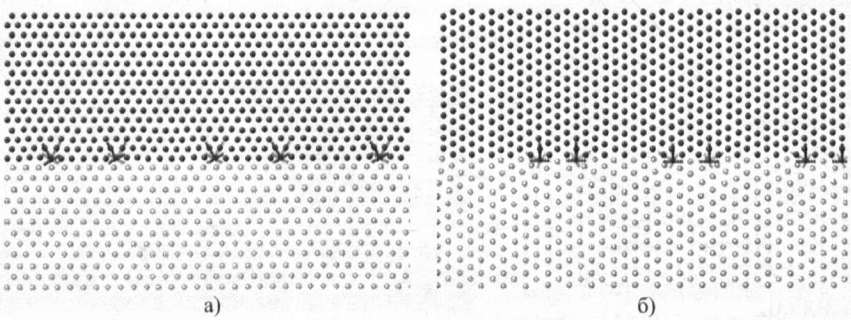


Рис.3. Дислокации несоответствия на межфазных границах Ni-Al, ориентированных вдоль направлений <110> (а) и <112> (б) в плоскости (111) ГЦК решетки. Атомы Ni – черные, Al – серые.

Из наблюдения динамики системы в процессе эксперимента было обнаружено, что в диффузии вблизи межфазной границы до температуры плавления Al определяющую роль играют дислокации несоответствия. Основными механизмами диффузии в двумерной модели являлись циклические смещения атомов вблизи ядра одной дислокации (рис.4а) и образование цепочек последовательно смещенных атомов от одной дислокации к другой (рис.4б). В процессе взаим-

ной диффузии, в результате образования гетерогенных связей Ni-Al, дислокации несоответствия перемещались (переползали) в сторону Al. Однако при этом диффузия также протекала за счет образования цепочек смещенных атомов либо вблизи одной дислокации (циклический механизм), либо между двумя дислокациями (рис.4в).

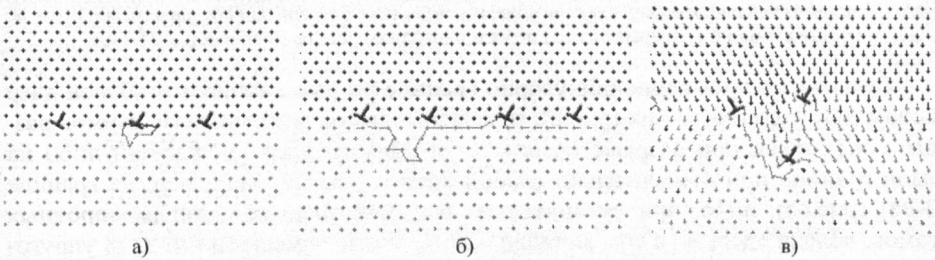


Рис.4. Примеры реализации механизмов диффузии по межфазной границе при твердофазном контакте: а) циклические смещения атомов вблизи ядра дислокации несоответствия; б, в) образование цепочки последовательно смещенных атомов от одной дислокации к другой.

При исследовании механизма пластической деформации рассматривались два направления деформирования расчетного блока: сжатие-растяжение перпендикулярно межфазной границе и вдоль нее. В первом случае вдоль границы задавались периодические граничные условия, поперек - гибкие, позволяющие расчетному блоку изменять объем. Во втором случае поперек границы задавались свободные условия, что позволяло дислокациям образовываться не только внутри расчетного блока, но и со свободной поверхности. Деформация в модели задавалась двумя способами: с помощью перемещения с постоянной скоростью «зажимов» (приграничных атомов) на противоположных сторонах расчетного блока или посредством изменения межатомных расстояний вдоль рассматриваемого направления в стартовой конфигурации расчетного блока.

Пластическая деформация с участием границы фаз играет ключевую роль, например, при сварке взрывом. В этом случае образуется прочное соединение металлических тел при высокоскоростном соударении со скоростями порядка 0,1–1 км/с [7]. При таких скоростях в зоне контакта имеет место сильная пластическая деформация вплоть до локального плавления. В большинстве случаев отмечается, что шов при сварке взрывом получается бездиффузионный, но очень высокой прочности. При моделировании соударения двух металлов с указанными скоростями было выяснено, что в этом случае заполняется большинство пустот и неровностей на границе, т.е. площадь контакта двух фаз на атомном уровне получается достаточно большой для прочного соединения. Кроме того, при соударении с высокой скоростью или сильном сжатии металлов перпендикулярно границе образуются пластические сдвиги, периодически повторяющиеся вдоль границы, причем период повторяемости подобных сдвигов кратен периоду повторяемости дислокаций несоответствия (рис.5).

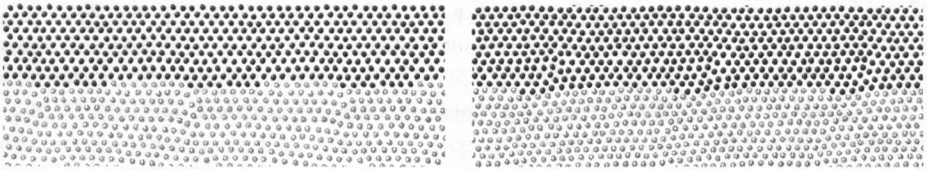
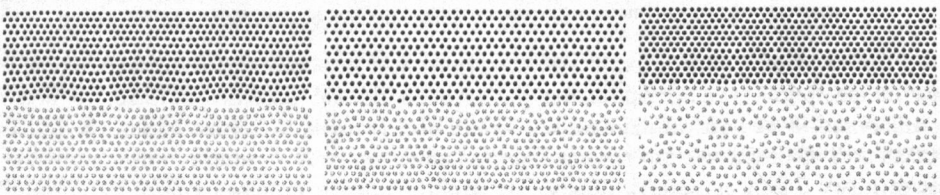


Рис.5. Образование периодических сдвигов вблизи межфазной границы при соударении металлов Ni (черные атомы) и Fe (серые атомы) перпендикулярно границе со скоростью 500 м/с.

При растяжении перпендикулярно границе разрыв начинается вблизи ядер дислокаций несоответствия (рис.6). В зависимости от энергии связи атомов разного сорта поры при разрыве возникают в области ядер дислокаций либо на самой границе при относительно слабой энергии связи (например, на границе Ni-Fe) (рис.6а), либо, при сравнительно высокой энергии связи разнородных атомов, вблизи ядер, но в том металле, который имеет меньший модуль упругости (рис.6 б, в).



а) б) в)

Рис.6. Появление пор вблизи межфазной границы при разрушении при растяжении в направлении перпендикулярном границе: а) Ni (черные атомы) - Fe (серые атомы); б) Au (черные атомы) - Cu (серые атомы); в) Ni (черные атомы) - Al (серые атомы).

При деформировании вдоль межфазной границы пластические сдвиги также начинались от дислокаций несоответствия. На рис.7 изображены расположение дислокаций и атомные смещения в расчетном блоке на начальной стадии пластической деформации при растяжении вдоль межфазной границы. На рисунках видно, что пластические сдвиги инициируются на дислокациях несоответствия и имеют клиновидную форму. Механизм образования пластических сдвигов зависит от энергии связи разнородных атомов, соотношения параметров решеток и модулей упругости. Так, для межфазной границы Ni-Fe характерен разрыв связей в Fe вблизи ядер дислокаций, после чего в нем возникают клиновидные сдвиги, распространяющиеся от первоначального положения ядер дислокаций (рис.7а). Для границы Au-Cu в тех же условиях характерным было перемещение дислокаций с межфазной границы в объем Au (рис.7б). Причина этого в том, что при одной и той же нагрузке различные металлы деформируются по разному, и наоборот, при одной и той же степени деформации внутренние напряжения в разных металлах отличаются. Похожий механизм наблюдался при растяжении вдоль границы биметалла Ni-Al (рис.7в). В этом случае половина дислокаций несоответствия мигрировала в Al. Во всех рассмотренных биметал-

лах пластическая деформация при растяжении начиналась со стороны того металла, который имел больший параметр решетки.

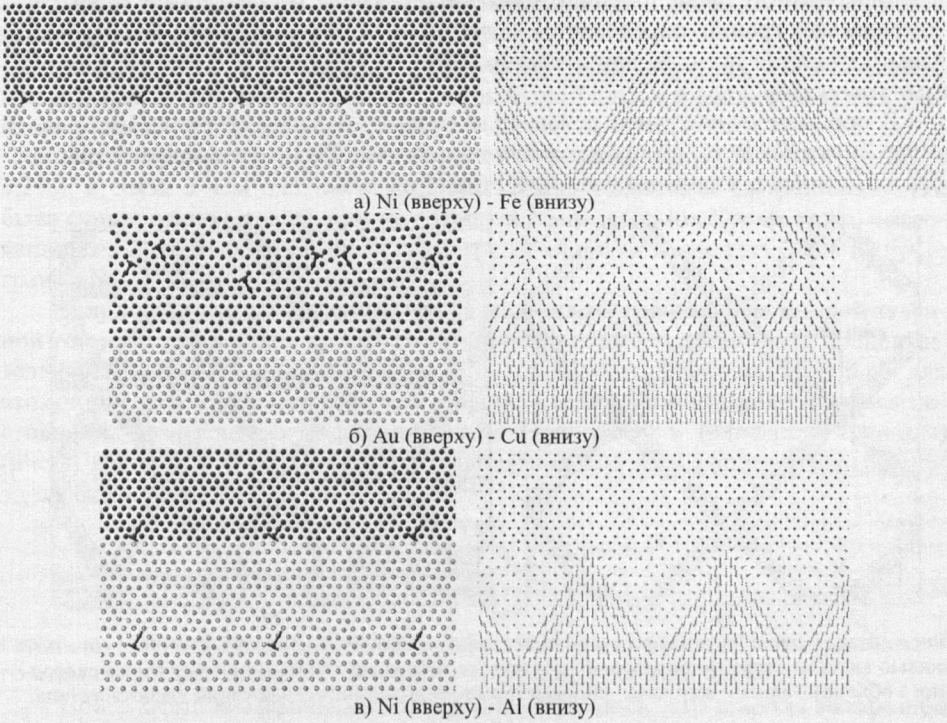
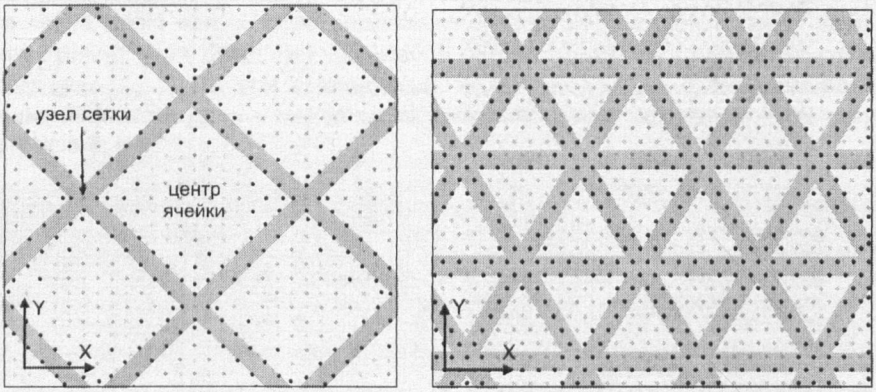


Рис.7. Пластические сдвиги при растяжении вдоль межфазной границы. Слева расположение дислокаций, справа изображения атомных смещений. а) Ni (вверху, черные атомы) - Fe (внизу, серые атомы); б) Au (вверху, черные атомы) - Cu (внизу, серые атомы); в) Ni (вверху, черные атомы) - Al (внизу, серые атомы).

При сжатии вдоль межфазной границы наблюдались аналогичные клиновидные пластические сдвиги, начинающиеся от дислокаций несоответствия. Но при сжатии, в отличие от растяжения, они сначала возникали, как правило, в металле, имеющем меньший параметр решетки. По всей видимости, это обусловлено тем, что при той же степени деформации в таких металлах возникают более высокие внутренние напряжения из-за относительно меньшего межатомного расстояния. Плотность дислокаций несоответствия, как и при растяжении, на самой границе уменьшалась, - они распределялись на некотором удалении от границы. При дальнейшем развитии деформации в обоих металлах возникали пластические сдвиги, распространяющиеся от свободных поверхностей. При этом они коррелировали со сдвигами, возникшими от дислокаций несоответствия, и имели зачастую тот же или кратный период повторяемости.

Четвертая глава посвящена исследованию структуры и диффузионной проницаемости межфазных границ Ni-Al, Cu-Au, Ni-γFe (100) и (111) в трехмерной модели. В главе проводится расчет характеристик диффузии вдоль рассматриваемых границ, определяется ведущий механизм диффузии. Вторая часть главы посвящена исследованию взаимодействия точечных дефектов с межфазными границами.

В процессе структурной релаксации (пример расчетного блока изображен на рис.2), в ходе которой происходило сопряжение фаз, на межфазной границе образовывались дислокации несоответствия (рис.8-9).



а) б)

Рис.8. Изображение дислокаций несоответствия на границах Ni-Al (100) (а) и (111) (б) с помощью визуализатора свободного объема (чем темнее атом, тем больше вокруг него свободного объема). Серыми жирными линиями показано положения дислокаций несоответствия.

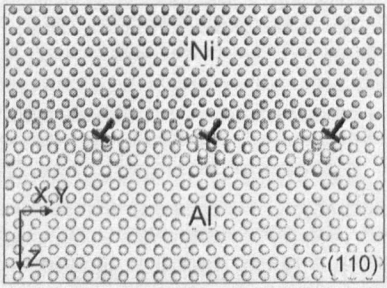


Рис.9. Дислокации несоответствия в проекции расчетного блока, содержащего границу Ni-Al (100), на плоскость (110).

На рис.8 изображены распределения свободного объема в плоскости межфазной границы Ni-Al. Визуализация свободного объема осуществлялась путем расчета среднего расстояния от каждого атома до ближайших атомов. Если среднее расстояние незначительно отличалось от расстояния, соответствующего идеальному кристаллу, атом не изображался. В противном случае атом закрашивался в тот или иной оттенок серого цвета.

На рис.8 отчетливо видны ядра дислокаций несоответствия (выделены серыми жирными линиями), которые в случае границы (100) образуют сетку с квадратными ячейками, состоящую из двух систем дислокаций, а в случае границы (111) – сетку с треугольными ячейками, состоящую из трех систем дислокаций. Дислокации краевые, что хорошо

видно на рис.9, где изображена проекция расчетного блока, содержащего границу Ni-Al (100), на плоскость (110). Дислокации несоответствия, изображенные на рис.9, аналогичны тем, которые наблюдаются в реальном эксперименте (рис.1).

Для границы Cu-Au были получены аналогичные картины, с тем отличием, что размеры ячеек дислокационных сеток были больше в связи с меньшей разностью параметров решеток Cu и Au.

Параметры решеток Ni и γ-Fe имеют близкие значения (отличие всего 3,2%), в связи с чем плотность дислокаций несоответствия на границе Ni-γFe была существенно меньше, чем на границах Ni-Al и Cu-Au. Кроме этого, дислокации зачастую не образовывали геометрически правильную сетку, как в случае границ Ni-Al и Cu-Au.

При исследовании диффузии вдоль межфазной границы для каждой заданной температуры в конце молекулярно-динамического эксперимента продолжительностью 200-400 пс рассчитывался коэффициент диффузии отдельно для атомов разного сорта. Температура в процессе эксперимента удерживалась постоянной. Коэффициент диффузии вдоль плоскости XY (плоскости границы) (рис.2) рассчитывался как среднее арифметическое коэффициентов диффузии вдоль осей X и Y:

$$D = \frac{\sum_{i=1}^{N}(x_{0i} - x_i)^2 + \sum_{i=1}^{N}(y_{0i} - y_i)^2}{4tN}, \qquad (2)$$

где x_{0i}, y_{0i} – координаты начального положения i-го атома; x_i, y_i – координаты i-го атома в момент времени t; N – число атомов в расчетном блоке.

При расчете коэффициента диффузии полагалось, что ширина межфазной границы 5 Å. Такая же ширина принималась в большинстве работ, посвященных диффузии вдоль границ раздела.

В целом, вдоль границ (111), несмотря на, казалось бы, более высокую плотность атомов в указанной плоскости, во всех случаях диффузия протекала интенсивнее, чем вдоль границ (100). По всей видимости, это обусловлено более высокой плотностью дислокаций несоответствия на границе (111) по сравнению с границей (100) (рис.8).

По наклону зависимостей $\ln(D)$ от T^{-1} были найдены энергии активации диффузии отдельно для атомов разного сорта. Вдоль межфазной границы Ni-Al (100): 0,5 эВ для Ni и 0,2 эВ для Al; вдоль границы Ni-Al (111): 0,5 и 0,3 эВ соответственно. Полученные значения близки значениям энергии активации диффузии по границам зерен в интерметаллиде Ni_3Al [8]: в зависимости от угла разориентации зерен энергия миграции атомов Al находится в диапазоне 0,2-0,3 эВ, атомов Ni – 0,1-0,3 эВ. Следовательно, диффузионная проницаемость межфазных границ сравнима с проницаемостью границ зерен.

Для границ Cu-Au (100) и (111) были получены следующие значения энергии активации миграции атомов Cu и Au: 0,1 эВ и 0,2 эВ соответственно. Для