УДК 538.91 doi: 10.18323/2073-5073-2018-1-11-16

© 2018

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ И АМОРФНОМ АЛЮМИНИИ

Е.В. Гончарова, аспирант кафедры общей физики,

младший научный сотрудник лаборатории «Физика некристаллических материалов» *Р.А. Кончаков*, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры общей физики, старший научный сотрудник лаборатории «Физика некристаллических материалов» *А.С. Макаров*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики, старший научный сотрудник лаборатории «Физика некристаллических материалов» *В.А. Хоник*, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей физики, главный научный сотрудник лаборатории «Физика некристаллических материалов» *В.А. Хоник*, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей физики, главный научный сотрудник лаборатории «Физика некристаллических материалов» *Воронежский государственный педагогический университет, Воронеж (Россия) Н.П. Кобелев*, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка (Россия)*

Ключевые слова: некристаллический алюминий; межузельные дефекты; сдвиговая восприимчивость; межузельная теория.

Аннотация: Работа посвящена исследованию микроскопических механизмов плавления металлов и структурной релаксации металлических стекол. Несмотря на обширные усилия и многочисленные важные результаты, полученные в этой области, эта задача не имеет общепринятого окончательного решения. Одним из основных вопросов является микроскопическая природа структурных дефектов в металлических стеклах – наноразмерных областей, которые ответственны за эволюцию их физических свойств при внешнем воздействии. Наиболее перспективную интерпретацию природы таких дефектов дает межузельная теория, предложенная Гранато. Межузельная теория основывается на уникальной гипотезе о межузельном механизме плавления металлов и связывает тепловые эффекты в стекле со сдвиговой упругостью материнского кристалла.

Экспериментальное исследование и компьютерное моделирование диаэластического эффекта вблизи температуры плавления T_m кристаллического алюминия послужили убедительным свидетельством лавинообразной генерации межузельных гантелей вблизи T_m . В настоящей работе было выполнено компьютерное моделирование, направленное на проверку наличия межузельных гантелей (или подобных им атомных структур) в твердом стеклообразном состоянии, полученном закалкой расплава.

Компьютерное моделирование показало, что аморфный алюминий, полученный быстрой закалкой расплава, содержит значительное количество «дефектов», аналогичных по своим свойствам межузельным гантелям в кристаллическом состоянии. Хотя эти «дефекты» не имеют четкой единообразной топологической структуры в отличие от дефектов кристалла, они могут быть однозначно идентифицированы по своим основным свойствам – высокой чувствительности к сдвиговым напряжениям и характерным низкочастотным/высокочастотным особенностям спектра колебательной плотности состояний «дефектных» атомов.

Методами молекулярной динамики и статики показано, что твердый некристаллический алюминий содержит специфические атомные конфигурации, подобные межузельным гантелям в кристаллическом состоянии, которые можно считать «дефектами» аморфной структуры.

введение

Микроскопические механизмы формирования стеклообразного состояния и релаксационных процессов, происходящих в стеклах, являются центральными вопросами физики некристаллических материалов [1-3]. Перспективный подход к решению этих вопросов дает межузельная теория (далее - МТ) Гранато [4], положившая начало целому ряду исследований. Например, МТ позволила аналитически интерпретировать эмпирические правила плавления Линдемана и Ричарда [5], а также установить связь между температурой плавления и модулем сдвига [6]. Подход, основанный на МТ, предлагает последовательную интерпретацию многочисленных проявлений структурной релаксации в металлических стеклах [7; 8], дает точное описание кинетики экзо-/эндотермических тепловых реакций при структурной релаксации и кристаллизации [9].

Согласно МТ, плавление металлических кристаллов происходит в результате быстрой генерации межузельных гантелей [10; 11], которые сохраняют свою инди-

видуальность в расплаве и стекле, полученном закалкой расплава. В недавней работе [12] путем экспериментального измерения температурной зависимости модуля сдвига монокристаллического алюминия было показано, что вблизи температуры плавления концентрация межузельных гантелей лишь в 2–3 раза меньше концентрации вакансий. Термоактивируемая генерация межузельных гантелей позволяет объяснить существенный нелинейный рост теплоемкости в области предплавильных температур, природа которого до настоящего времени не имела однозначной интерпретации [13]. Таким образом, межузельные гантели играют важную роль в механизме плавления металлических одноатомных кристаллов.

Общеизвестно, что межузельные гантели существуют во всех основных кристаллических структурах [14; 15]. Характерным свойством межузельных гантелей является их способность эффективно взаимодействовать с полем внешних напряжений. В результате этого взаимодействия, помимо однородной деформации, возникают дополнительные деформации, связанные с локальным нарушением симметрии кристалла в области дефектов [16–18]. Аналогично, при наличии однородной деформации в области межузельной гантели возникают неоднородные (индуцированные) напряжения. Неоднородные деформации в кристалле являются обратимыми, в отличие от аморфной системы, где неоднородные деформации вызваны необратимыми перемещениями атомов в области «дефектов».

Идентификация межузельных гантелей в кристаллической структуре не вызывает каких-либо затруднений. В то же время идентификация «дефектов» в некристаллическом веществе является весьма нетривиальной задачей. Решению этой задачи посвящена настоящая работа. Компьютерное моделирование меди показало, что после плавления кристалла межузельные дефекты остаются идентифицируемыми структурными единицами в жидком состоянии и сохраняют основные свойства межузельных гантелей в кристалле [19]. Для идентификации в аморфной структуре атомных конфигураций, подобных межузельным дефектам в кристаллах, использовались основные свойства межузельных гантелей, а именно их высокая чувствительность к сдвиговым напряжениям [5] и особенности спектра колебательной плотности состояний атомов, формирующих межузельную гантель [20].

Цель работы – показать, что аморфный алюминий содержит группы атомов, которые проявляют основные свойства межузельных гантелей в кристалле, то есть имеют высокую сдвиговую восприимчивость и характерные особенности колебательного спектра.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для реализации компьютерной модели алюминия был использован классический молекулярно-динамический пакет LAMMPS [21] с межатомным потенциалом типа ЕАМ (метод погруженного атома) [22]. Модель аморфного алюминия была получена следующим образом. Монокристалл. состоящий из 4000 атомов (10×10×10 трансляций элементарной ячейки), плавился и выдерживался при температуре 2000 К в течение 10 ns. Контроль температуры осуществлялся термостатом Нозе-Гувера (Nose-Hoover) [23; 24], контроль давления производился баростатом Берендсена (Berendsen) [25]. Затем осуществлялось охлаждение до 0 К со скоростью 10¹³ K/s. Интегрирование уравнений движения осуществлялось методом Верле (Verlet) [26; 27], шаг интегрирования по времени был выбран равным 2 fs, что соответствует примерно 0,015 периода колебаний атомов. Минимизация потенциальной энергии системы (структурная релаксация) в результате которой атомы занимали устойчивые положения, производилась методом наискорейшего спуска. Колебательная плотность состояний вычислялась как квадрат модуля Фурьепреобразования автокорреляционной функции скорости атомов v(t) [28]:

$$VDOS(\omega) = \left| \int e^{-i\omega t} < v(t)v(0) > dt \right|^2.$$

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

В результате моделирования были рассчитаны компоненты тензора диаэластической поляризуемости межузельной гантели и вакансии в монокристаллическом алюминии. Установленная связь тензора диаэластической поляризуемости с основным параметром межузельной теории – сдвиговой восприимчивостью – позволила оценить величину сдвиговой восприимчивости как для межузельной гантели, так и для вакансии. Из усредненных (сдвиговых) компонент матрицы сдвиговой восприимчивости было получено значение сдвиговой восприимчивости было получено значение сдвиговой восприимчивости $\beta_i = 26,5$ для межузельной гантели. Этот результат близок к экспериментальному значению $\beta_i = 27 \pm 2$, полученному путем анализа измерений модуля сдвига монокристалла алюминия [29].

Расчет диаэластической поляризуемости и сдвиговой восприимчивости монокристалла алюминия был проделан и для вакансии. Компоненты тензора диаэластической поляризуемости оказались приблизительно на порядок меньше, чем для межузельной гантели. Компоненты матрицы сдвиговой восприимчивости для вакансии тоже на порядок меньше, чем для межузельной гантели, что находится в соответствии с результатами работ [16; 30]. Сдвиговые компоненты тензора диаэластической поляризуемости позволяют рассчитать значение сдвиговой восприимчивости, которое согласуется с экспериментальным значением $\beta_v \approx 2$ для вакансии в алюминии [30]. Таким образом, сравнение сдвиговых компонент матрицы сдвиговой восприимчивости для вакансии и межузельной гантели приводит к выводу о том, что межузельные гантели должны производить на порядок большее уменьшение модуля сдвига в отличие от вакансий, что находится в полном соответствии с экспериментами по алюминию [12; 29; 31] и меди [32; 33].

Для аморфного алюминия была произведена оценка концентрации структурных дефектов. Для этого сравнивались характерные значения тензоров поляризуемости монокристалла с одним дефектом и усредненной интегральной поляризуемости аморфного алюминия. Среднее значение диагональных компонент тензора диаэластической поляризуемости кристаллического алюминия составило $<\alpha^{crystal} >= 0,69 \times 10^3$ GPa, а для аморфного алюминия – $N^{def} < \alpha^{glass} >= 82,0 \times 10^3$ GPa. Тогда концентрацию дефектов в аморфном алюминии можно оценить как

$$c = \frac{N^{def} < \alpha^{glass} >}{N < \alpha^{crystal} >} \times 100\% \approx 3\%, \qquad (1)$$

где N – число атомов в модельной системе. Кроме того, концентрацию структурных дефектов можно оценить, используя основное уравнение МТ, которое для стеклообразного состояния будет иметь следующий вид

$$G^{glass} = G^{crystal} \exp\left(-\alpha_g \beta c\right), \tag{2}$$

где $G^{glass} = 11,4$ GPa, $G^{crystal} = 30,5$ GPa, безразмерная величина $\alpha_g \approx 1$ и $\beta = 27$.

С указанными выше параметрами уравнение (2) дает концентрацию дефектов c = 3,7 %, что довольно близко к расчету по формуле (1).

Для расчета тензоров диаэластической поляризуемости отдельных структурных дефектов в аморфном алюминии необходимо было сначала эти дефектные области каким-либо образом идентифицировать [16]. Если предположить, что дефекты распределены равномерно по объему модельной системы, то можно оценить характерный размер структурного дефекта. Зная концентрацию дефектов (около 3 %), легко вычислить, что на один структурный дефект приходится примерно 33 атома, что соответствует размеру дефекта $R_{def} \sim 1,2a$, где постоянная кристаллической решетки алюминия a = 4,05 Å.

Для монокристаллического и аморфного алюминия были определены локальные тензоры диаэластической податливости отдельной межузельной гантели. Расчеты диаэластической податливости дают принципиальную возможность сравнить локальные характеристики дефектов в кристаллическом и аморфном алюминии. Межузельные дефекты проявляют высокую чувствительностью к сдвиговому напряжению. Это означает, что в тензоре диаэластической податливости сдвиговые компоненты должны быть намного больше по абсолютной величине, чем дилатационные компоненты. Действительно, расчеты локальной диаэластической податливости для кристаллического алюминия показали, что среднее значение сдвиговых компонент примерно в 11 раз превышает значение дилатационных компонент.

Для аморфного алюминия наблюдается аналогичная ситуация, т. е. среднее значение сдвиговых компонент в тензорах локальной диаэластической податливости примерно в 11–12 раз больше, чем для дилатационных компонент. Это свидетельствует о том, что соответствующие локальные области в стекле (дефекты) обладают повышенной сдвиговой чувствительностью.

Было показано, что колебательные спектры дефектных атомов в аморфном алюминии имеют те же характерные особенности, что и атомы, образующие межузельную гантель в кристалле. На рисунке 1 а показана колебательная плотность состояний одного из атомов,

образующих межузельную гантель в монокристалле алюминия. В колебательном спектре присутствуют характерные низкочастотные (около 2 THz) и высокочастотные (выше дебаевской частоты) пики. Эти особенности колебательной плотности состояний были предсказаны для ГЦК решетки довольно давно [20; 34]. Для сравнения на рисунке 1 б представлена локальная колебательная плотность состояний атомов, принадлежащих к идеальной решетке. В этом случае низкочастотные и высокочастотные пики колебательной плотности состояний, характерные для межузельной гантели, отсутствуют. На рисунке 2 показаны локальные колебательные спектры двух разных атомов в аморфном алюминии, которые были идентифицированы как дефектные, то есть испытывающие большие неоднородные смещения при сдвиговой деформации.

Видно, что на рисунке 2 спектры также имеют выраженные низкочастотные и высокочастотные пики. Таким образом, колебательные спектры «дефектных» атомов аморфного алюминия сохраняют основные черты колебательных спектров межузельных гантелей в кристалле.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Анализ колебательных спектров и индуцированных напряжений в кристаллическом и аморфном алюминии показал, что в аморфном состоянии присутствуют атомные конфигурации, обладающие характерными свойствами межузельных гантелей в кристалле. Полученные результаты могут служить подтверждением основной идеи МТ о том, что плавление кристаллов происходит за счет быстрой генерации межузельных гантелей, которые остаются идентичными структурными единицами в жидком состоянии, а также в твердом некристаллическом состоянии, полученном закалкой расплава.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках проекта 3.1310.2017/4.6.



Рис. 1. Локальные спектры колебательной плотности состояний. (a) – для отдельного атома, принадлежащего к межузельной гантели; (б) – для произвольного атома идеальной решетки



Рис. 2. Локальная колебательная плотность состояний атомов, принадлежащих двум различным дефектам в аморфном алюминии

Статья подготовлена по материалам докладов участников VIII Международной школы «Физическое материаловедение» с элементами научной школы для молодежи, Тольятти, 3–12 сентября 2017 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Debenedetti P.G., Stillinger F.H. Supercooled liquids and the glass transition // Nature. 2001. Vol. 410. P. 259–267.
- Dyre J.C. The glass transition and elastic models of glass-forming liquids // Reviews of Modern Physics. 2006. Vol. 78. P. 953–972.
- Langer J. The mysterious glass transition // Physics Today. 2007. Vol. 60. P. 8–9.
- Granato A.V. Self-interstitials as basic structural units of liquids and glasses // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1994. Vol. 55. № 10. P. 931–939.
- Granato A.V. A Comparison with empirical results of the interstitialcy theory of condensed matter // Journal of Non-Crystalline Solids. 2006. Vol. 352. P. 4821– 4825.
- Granato A.V., Joncich D.M., Khonik V.A. Melting, thermal expansion, and the Lindemann rule for elemental substances // Applied Physics Letters. 2010. Vol. 97. P. 171911-1–171911-3.
- Khonik S.V., Granato A.V., Joncich D.M., Pompe A., Khonik V.A. Evidence of Distributed Interstitialcy-Like Relaxation of the Shear Modulus due to Structural Relaxation of Metallic Glasses // Physical Review Letters. 2008. Vol. 100. P. 065501-1–065501-4.
- Mitrofanov Yu.P., Wang D.P., Wang W.H., Khonik V.A. Interrelationship between heat release and shear modulus change due to structural relaxation of bulk metallic glasses // Journal of Alloys and Compounds. 2016. Vol. 677. P. 80–86.
- Mitrofanov Yu.P., Wang D.P., Makarov A.S., Wang W.H., Khonik V.A. Towards understanding of heat effects in metallic glasses on the basis of macroscopic shear elasticity // Scientific Reports. 2016. Vol. 6. P. 23026-1– 23026-6.

- Granato A.V. Interstitialcy model for condensed matter states of face-centered-cubic metals // Physical Review Letters. 1992. Vol. 68. № 7. P. 974–977.
- Granato A.V. Interstitialcy theory of simple condensed matter // European Physical Journal B. 2014. Vol. 87. P. 18-1–18-6.
- 12. Safonova E.V., Mitrofanov Yu.P., Konchakov R.A., Vinogradov A.Yu., Kobelev N.P., Khonik V.A. Experimental evidence for thermal generation of interstitials in a metallic crystal near the melting temperature // Journal of Physics: Condensed Matter. 2016. Vol. 28. № 21. P. 215401-1–215401-12.
- 13. Safonova E.V., Konchakov R.A., Mitrofanov Yu.P., Kobelev N.P., Vinogradov A.Yu., Khonik V.A. Contribution of Interstitial Defects and Anharmonicity to the Premelting Increase in the Heat Capacity of Single-Crystal Aluminum // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. 2016. Vol. 103. № 12. P. 765–768.
- Ehrhart P., Robrock K.H., Schober H.R. Physics of Radiation Effects in Crystals. Amsterdam: Elsevier, 1986. Vol. 3. P. 3–115.
- 15. Wolfer W.G. Fundamental Properties of Defects in Metals // Comprehensive Nuclear Materials. Amsterdam: Elsevier, 2012. P. 1–45.
- 16. Кончаков Р.А., Кобелев Н.П., Хоник В.А., Макаров А.С. Упругие диполи в модели монокристаллической и аморфной меди // Физика твердого тела. 2016. Т. 58. № 2. С. 209–216.
- Weaire D. On the use of pair potentials to calculate the properties of amorphous metals // Acta Metallurgica. 1971. Vol. 19. P. 779–788.
- Safarik D. Elastic constants of amorphous and singlecrystal Pd₄₀Cu₄₀P₂₀ // Acta Materialia. 2007. Vol. 55. P. 5736–5746.
- Nordlund K., Ashkenazy Y., Averback R.S., Granato A.V. Strings and interstitials in liquids, glasses and crystals // Europhysics Letters. 2005. Vol. 71. № 4. P. 625–631.
- Dederichs P.H., Lehmann C., Schober H.R., Scholz A., Zeller R. Lattice theory of point defects // Journal of Nuclear Materials. 1978. Vol. 69-70. P. 176–199.

- Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // Journal of Computational Physics. 1995. Vol. 117. P. 1–19.
- 22. Sheng H.W., Kramer M.J., Cadien A., Fujita T., Chen M.W. Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals // Physical Review B. 2011. Vol. 83. P. 134118-1–134118-20.
- 23. Nose S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods // Journal of Chemical Physics. 1984. Vol. 81. P. 511–519.
- Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phasespace distributions // Physical Review A. 1985. Vol. 31. P. 1695–1697.
- 25. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. Molecular dynamics with coupling to an external bath // Journal of Chemical Physics. 1984. Vol. 81. P. 3684–3690.
- Verlet L. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules // Physical Review. 1967. Vol. 159. P. 98–103.
- 27. Tuckerman M.E., Alejandre J., López-Rendon R., Jochim A.L., Martyna G.J. A Liouville-operator derived measure-preserving integrator for molecular dynamics simulations in the isothermal - isobaric ensemble // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2006. Vol. 39. P. 5629–5651.
- Dickey J.M., Paskin A. Computer Simulation of the Lattice Dynamics of Solids // Physical Review. 1969. Vol. 188. P. 1407–1418.
- Robrock K.-H., Schilling W. Diaelastic modulus change of aluminum after low temperature electron irradiation // Journal of Physics F: Metal Physics. 1976. Vol. 6. P. 303–314.
- Gordon C.A., Granato A.V. Equilibrium concentration of interstitials in aluminum just below the melting temperature // Materials Science and Engineering A. 2004. Vol. 370. P. 83–87.
- Robrock K.-H. Mechanical Relaxation of Interstitials in Irradiated Metals. Berlin: Springer, 1990. 105 p.
- 32. Rehn L.E., Holder J., Granato A.V., Coltman R.R., Young F.W. Effects of thermal-neutron irradiation on the elastic constants of copper // Physical Review B. 1974. Vol. 10. P. 349–362.
- Holder J., Granato A.V., Rehn L.E. Effects of selfinterstitials and close pairs on the elastic constants of copper // Physical Review B. 1974. Vol. 10. P. 363–375.
- Scholz A., Lehman C. Stability Problems, Low-Energy-Recoil Events, and Vibrational Behavior of Point Defects in Metals // Physical Review B. 1972. Vol. 6. P. 813–826.

REFERENCES

- 1. Debenedetti P.G., Stillinger F.H. Supercooled liquids and the glass transition. *Nature*, 2001, vol. 410, pp. 259–267.
- Dyre J.C. The glass transition and elastic models of glass-forming liquids. *Reviews of Modern Physics*, 2006, vol. 78, pp. 953–972.
- 3. Langer J. The mysterious glass transition. *Physics Today*, 2007, vol. 60, pp. 8–9.
- Granato A.V. Self-interstitials as basic structural units of liquids and glasses. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1994, vol. 55, no. 10, pp. 931–939.

- Granato A.V. A Comparison with empirical results of the interstitialcy theory of condensed matter. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2006, vol. 352, pp. 4821–4825.
- Granato A.V., Joncich D.M., Khonik V.A. Melting, thermal expansion, and the Lindemann rule for elemental substances. *Applied Physics Letters*, 2010, vol. 97, pp. 171911-1–171911-3.
- Khonik S.V., Granato A.V., Joncich D.M., Pompe A., Khonik V.A. Evidence of Distributed Interstitialcy-Like Relaxation of the Shear Modulus due to Structural Relaxation of Metallic Glasses. *Physical Review Letters*, 2008, vol. 100, pp. 065501-1–065501-4.
- Mitrofanov Yu.P., Wang D.P., Wang W.H., Khonik V.A. Interrelationship between heat release and shear modulus change due to structural relaxation of bulk metallic glasses. *Journal of Alloys and Compounds*, 2016, vol. 677, pp. 80–86.
- 9. Mitrofanov Yu.P., Wang D.P., Makarov A.S., Wang W.H., Khonik V.A. Towards understanding of heat effects in metallic glasses on the basis of macroscopic shear elasticity. *Scientific Reports*, 2016, vol. 6, pp. 23026-1–23026-6.
- 10. Granato A.V. Interstitialcy model for condensed matter states of face-centered-cubic metals. *Physical Review Letters*, 1992, vol. 68, no. 7, pp. 974–977.
- 11. Granato A.V. Interstitialcy theory of simple condensed matter. *European Physical Journal B*, 2014, vol. 87, pp. 18-1–18-6.
- 12. Safonova E.V., Mitrofanov Yu.P., Konchakov R.A., Vinogradov A.Yu., Kobelev N.P., Khonik V.A. Experimental evidence for thermal generation of interstitials in a metallic crystal near the melting temperature. *Journal* of *Physics: Condensed Matter*, 2016, vol. 28, no. 21, pp. 215401-1–215401-12.
- Safonova E.V., Konchakov R.A., Mitrofanov Yu.P., Kobelev N.P., Vinogradov A.Yu., Khonik V.A. Contribution of Interstitial Defects and Anharmonicity to the Premelting Increase in the Heat Capacity of Single-Crystal Aluminum. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 2016, vol. 103, no. 12, pp. 765– 768.
- Ehrhart P., Robrock K.H., Schober H.R. Physics of Radiation Effects in Crystals. Amsterdam, Elsevier Publ., 1986. Vol. 3, pp. 3–115.
- Wolfer W.G. Fundamental Properties of Defects in Metals. *Comprehensive Nuclear Materials*. Amsterdam, Elsevier Publ., 2012, pp. 1–45.
- 16. Konchakov R.A., Khonik V.A., Makarov A.S., Kobelev N.P. Elastic dipoles in the model of singlecrystal and amorphous copper. *Physics of the Solid State*, 2016, vol. 58, no. 2, pp. 215–222.
- 17. Weaire D. On the use of pair potentials to calculate the properties of amorphous metals. *Acta Metallurgica*, 1971, vol. 19, pp. 779–788.
- Safarik D. Elastic constants of amorphous and singlecrystal Pd₄₀Cu₄₀P₂₀. *Acta Materialia*, 2007, vol. 55, pp. 5736–5746.
- Nordlund K., Ashkenazy Y., Averback R.S., Granato A.V. Strings and interstitials in liquids, glasses and crystals. *Europhysics Letters*, 2005, vol. 71, no. 4, pp. 625–631.
- Dederichs P.H., Lehmann C., Schober H.R., Scholz A., Zeller R. Lattice theory of point defects. *Journal of Nuclear Materials*, 1978, vol. 69-70, pp. 176–199.

- Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, vol. 117, pp. 1–19.
- 22. Sheng H.W., Kramer M.J., Cadien A., Fujita T., Chen M.W. Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals. *Physical Review B*, 2011, vol. 83, pp. 134118-1–134118-20.
- 23. Nose S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *Journal of Chemical Physics*, 1984, vol. 81, pp. 511–519.
- Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phasespace distributions. *Physical Review A*, 1985, vol. 31, pp. 1695–1697.
- Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. Molecular dynamics with coupling to an external bath. *Journal of Chemical Physics*, 1984, vol. 81, pp. 3684–3690.
- Verlet L. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Physical Review*, 1967, vol. 159, pp. 98–103.
- 27. Tuckerman M.E., Alejandre J., López-Rendon R., Jochim A.L., Martyna G.J. A Liouville-operator derived measure-preserving integrator for molecular dynamics simulations in the isothermal - isobaric ensemble. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2006, vol. 39, pp. 5629–5651.

- Dickey J.M., Paskin A. Computer Simulation of the Lattice Dynamics of Solids. *Physical Review*, 1969, vol. 188, pp. 1407–1418.
- 29. Robrock K.-H., Schilling W. Diaelastic modulus change of aluminum after low temperature electron irradiation. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1976, vol. 6, pp. 303–314.
- Gordon C.A., Granato A.V. Equilibrium concentration of interstitials in aluminum just below the melting temperature. *Materials Science and Engineering A*, 2004, vol. 370, pp. 83–87.
- Robrock K.-H. Mechanical Relaxation of Interstitials in Irradiated Metals. Berlin, Springer Publ., 1990. 105 p.
- 32. Rehn L.E., Holder J., Granato A.V., Coltman R.R., Young F.W. Effects of thermal-neutron irradiation on the elastic constants of copper. *Physical Review B*, 1974, vol. 10, pp. 349–362.
- 33. Holder J., Granato A.V., Rehn L.E. Effects of selfinterstitials and close pairs on the elastic constants of copper. *Physical Review B*, 1974, vol. 10, pp. 363– 375.
- Scholz A., Lehman C. Stability Problems, Low-Energy-Recoil Events, and Vibrational Behavior of Point Defects in Metals. *Physical Review B*, 1972, vol. 6, pp. 813–826.

© 2018

COMPUTER SIMULATION OF STRUCTURAL DEFECTS IN MONOCRYSTALLINE AND AMORPHOUS ALUMINUM

E.V. Goncharova, postgraduate student of Chair of general physics,

junior researcher of Laboratory "Physics of Non-Crystalline Materials"

R.A. Konchakov, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, assistant professor of Chair of general physics,

senior researcher of Laboratory "Physics of Non-Crystalline Materials"

A.S. Makarov, PhD (Physics and Mathematics), assistant professor of Chair of general physics,

senior researcher of Laboratory "Physics of Non-Crystalline Materials"

V.A. Khonik, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor, Head of Chair of general physics,

chief researcher of Laboratory "Physics of Non-Crystalline Materials"

Voronezh State Pedagogical University, Voronezh (Russia)

N.P. Kobelev, PhD (Physics and Mathematics), senior researcher

Institute for Solid State Physics RAS, Chernogolovka (Russia)

Keywords: non-crystalline aluminum; interstitial defects; shear susceptibility; interstitialcy theory.

Abstract: The paper covers the study of microscopic mechanisms of melting of metals and the structural relaxation of metallic glasses. Despite the extensive efforts and numerous important results obtained in this field, this task does not have a generally accepted final solution. One of the main issues is the microscopic nature of structural defects in metallic glasses – the nanosized regions, which are responsible for the evolution of their physical properties under the external influence. The interstitialcy theory (IT) proposed by Granato provides the advanced interpretation of nature of such defects. The interstitialcy theory is based on the unique hypothesis of the interstitialcy mechanism for melting of metals and associates heat effects in the glass with the shear elasticity of a maternal crystal.

The experimental study and computer simulation of the diaelastic effect near the melting temperature T_m of crystalline aluminum provided a strong evidence of the avalanche generation of interstitial dumbbells near T_m . In this work, the authors carried out the computer simulation to check the presence of interstitial dumbbells (or similar atomic structures) in the solid glassy state produced in the result of melt- quench.

The computer simulation shows that the amorphous aluminum produced by rapid melt quenching contains a significant number of "defects" similar in their properties to the interstitial dumbbells in the crystalline state. Although these "defects" do not have any well-defined uniform topological structure, unlike the defects of crystal, and they can be exactly identified by their basic properties – high sensitivity to shear stresses and typical low/high-frequency peculiarities of the spectrum of the vibrational density of states of the "defective" atoms.

Using the methods of molecular dynamics and statics, it is shown that the solid non-crystalline aluminum contains the specific atomic configurations similar to the interstitial dumbbells in the crystalline state, which can be considered as the amorphous structure "defects".