

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОВОЛОКОН ПЛАТИНЫ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ РАСТЯЖЕНИЕМ

Богданов А.С. – магистрант

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

В настоящее время наибольший интерес вызывают нановолокна с периодическими структурными неоднородностями наномасштаба. Это полупроводниковые системы и системы, которые включают в себя наноструктурированные металлы и сплавы.

Под нановолокном, имеющим длиннопериодическую структуру, подразумевают протяженный монокристалл, в кристаллической решётке которого периодически внедрены антифазные границы (АФГ) в направлении деформации [1].

Объект исследования в настоящей работе - это нановолокно Pt на основе ГЦК решетки. Размеры нановолокна в работе составляют 10368 атомов. Ориентация боковых граней (типа {001}) с квадратным основанием (наиболее плотной упаковкой), такое расположение атомов является энергетически выгодным, а, следовательно, более устойчивым.

При исследовании процессов структурно-энергетических превращений в нановолокнах Pt, подвергнутых высокоскоростной деформации растяжением, получено, что общим для всех типов нановолокна при температурах 10, 600, 1500 К является присутствие четырех стадий деформации (рис. 1а): (I) квазиупругой деформации; (II) пластической деформации; (III) течения; (IV) разрушения. На каждой стадии деформации реализуются характерные для нее механизмы структурно-энергетических превращений [2, 3].

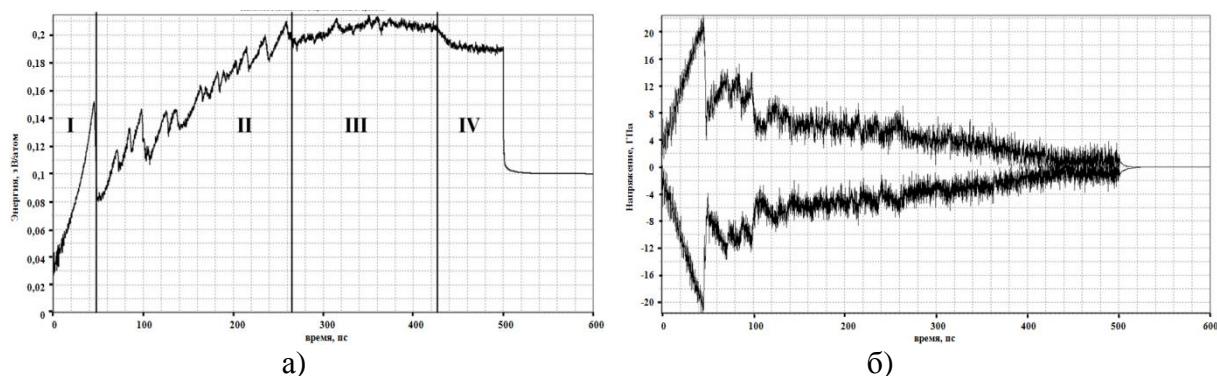


Рис. 1. Графики зависимости растяжения нановолокна $\langle 001 \rangle$ Pt при температуре 600 К от времени: а) запасенной энергии деформации; б) напряжения на зажимах

Наглядным примером стадийности структурно-энергетических превращений, происходящих во время высокоскоростной деформации растяжением, является график зависимости запасенной энергии деформации от времени и напряжения на жестких захватах (рис. 1 а-б).

В процессе одноосной деформации в нановолокне образовалась шейка. Образование шейки было вызвано скольжением частей нановолокна друг относительно друга и постепенным уменьшением толщины в центральной части нановолокна. После разрушения нановолокна $\langle 001 \rangle$ Pt при температуре 10 К, поверхность в области разрушения имела заостренную форму (рис. 2а), что характерно для разрушения при низких температурах. При температуре 1500 К, поверхность в области разрушения имела затупленную форму (рис. 2б), что присуще разрушению при высоких температурах, характер разрушения двух образовавшихся блоков соответствует вязкому разрушению. На местоположение шейки и характер разрушения, также влияет наличие планарных дефектов в нановолокне [3, 4].

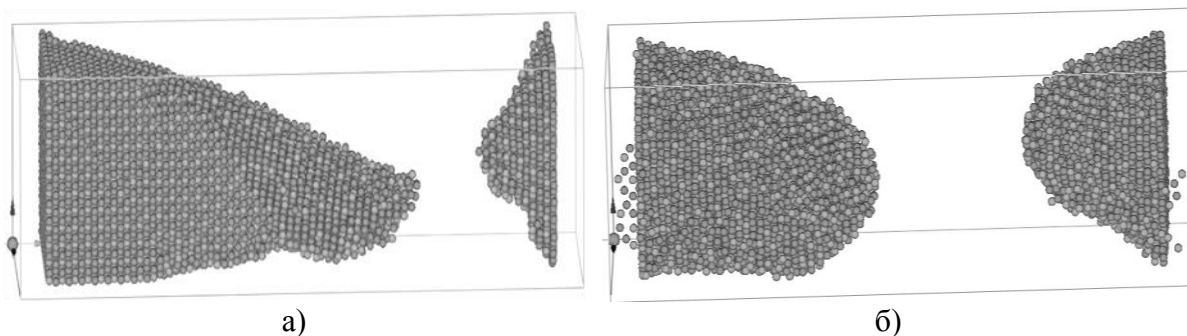


Рис. 2. Нановолокно Pt: а) при температуре 10 К на 380 пс деформации; б) при температуре 1500 К на 330 пс

Структурно-энергетические превращения в нановолокне $\langle 001 \rangle$ Pt в процессе деформации отражают графики зависимости запасенной энергии деформации от времени (рис. 3а) и напряжения на захватах от времени (рис. 3б). При температуре 10 К происходило скольжение крупных блоков нановолокна друг относительно друга без восстановления структуры. Меньшая длительность первой стадии деформации указывает на более хрупкий характер структурно-энергетических превращений в нановолокне.

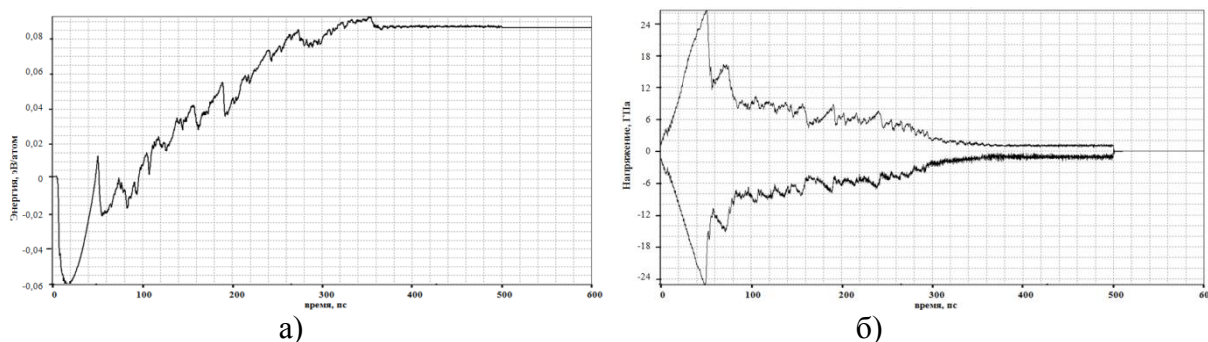


Рис. 3. Графики зависимости: а) запасенной энергии деформации от времени; б) напряжения на захватах от времени в нановолокне Pt $\langle 001 \rangle$ при температуре 10 К

В нановолокне $\langle 001 \rangle$ Pt при температуре 1500 К атомы обладали существенно большей подвижностью, чем при низких температурах.

Графики зависимости запасенной энергии деформации (рис. 4а) и напряжений на захватах от времени (рис. 4б) построенные при температуре 1500 К еще сильнее размыты, что связано с большей флуктуацией атомных колебаний. При температуре 1500 К деформация проходит не через скольжение по кристаллографическим плоскостям. Это отражено в виде незначительного падения графика запасенной энергии на 30 пс (рис. 4а). С этого момента значения напряжения на захватах снижались (рис. 4б). Также необходимо отметить, что при температуре 1500 К отделение и движение единичных атомов на поверхности нановолокна наблюдалось только вблизи областей деформации. Т.к. плоскость типа $\{001\}$ достаточно плотно упакована, диффузия на поверхности отсутствует.

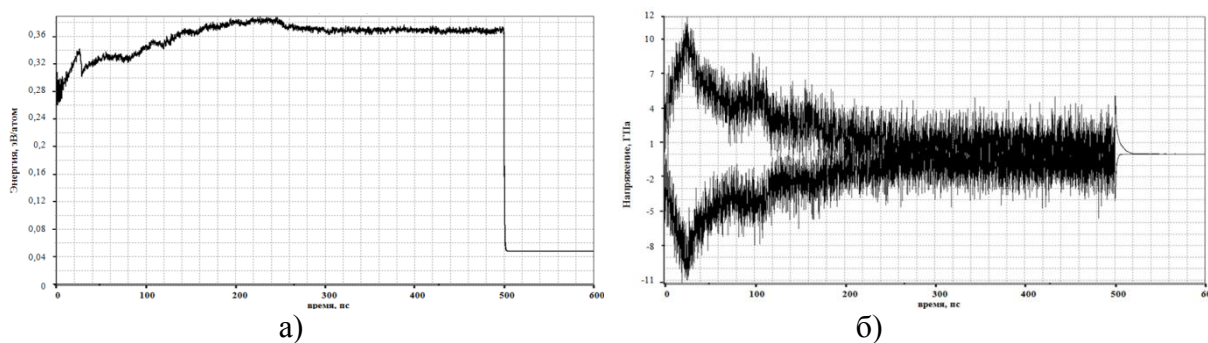


Рис. 4. Графики зависимости: а) запасенной энергии деформации от времени; б) напряжения на захватах от времени в нановолокне Pt <001> при температуре 1500 К

Амплитуда колебаний графиков зависимости запасенной энергии деформации от времени растяжения на стадии пластической деформации увеличивается с ростом температуры. Это происходит за счет увеличения амплитуды термических флуктуаций атомов нановолокна.

К окончанию первой стадии деформации расщепление атомных плоскостей начинает происходить вблизи жестких захватов, что приводит к образованию трещины на границе раздела между абсолютно жесткими захватами и расчетным блоком нановолокна. В конце первой стадии деформации вблизи захватов регистрируются значительные атомные смещения. Максимальная величина деформирующего напряжения на захватах нановолокна <001> Pt достигает 12 ГПа.

Таким образом, как показало молекулярно-динамическое моделирование, в результате деформации растяжением нановолокон Pt, выявлены четыре стадии деформации структурно-энергетических превращений: квазиупругая, пластическая, течения и разрушения. Ориентация оси растяжения оказывают влияние на особенности структурно-энергетических превращений в нановолокнах. На стадии разрушения нановолокно разделяется на две части. Показано, что характер разрушения блоков соответствует хрупкому разрушению при низких температурах и вязкому при повышении температуры эксперимента.

Эксперименты в работе проводились в программном продукте для ЭВМ "Моделирование структурных превращений в сплавах методом молекулярной динамики при различных температурах с использованием парных потенциалов Морза". - Свидетельство об официальной регистрации программ для ЭВМ №2007611472 от 09.04.2007 г.

Список использованной литературы:

1. Андриевский Р.А., Глезер А.М. Прочность наноструктур. М.: УФН, 2009. С. 337-357.
2. Старостенков М.Д., Сеница Н.В., Яшин А.В. Структурная перестройка в нановолокне Ni3Al, содержащем парные неконсервативные антифазные границы, при высокоскоростной одноосной деформации растяжения // Вестник Тамбовского университета, серия: Естественные и технические науки, Т.15, вып.3, 2010. – с.1072-1073.
3. Koh S.J.A., Lee H.P. Molecular dynamics simulation of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires // Nanotechnology. - 2006. – V. 17. – P. 3451–3467.
4. Яшин А.В., Сеница Н.В., Хорошилов Д.Е., Старостенков М.Д., Дудник Е.А. Исследование участков сверхструктурных разрушений при одноосной динамической деформации в сплаве Ni3Al // Материалы Международной научно-технической школы-конференции «Молодые ученые - науке, технологиям и профессиональному образованию». - М.: Энергоатомиздат. - 2008. – Ч. 3. - С. 160-163.

ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В Pd И Ni ПО ОТНОШЕНИЮ К ВОДОРОДУ

Кулабухова Н.А. - аспирант

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Взаимодействие водорода с металлами остается предметом интенсивного изучения на протяжении последнего столетия. С одной стороны, это обусловлено практическим интересом в использовании системы металл-водород: создание радиационноустойчивых материалов, фильтров для получения чистого водорода, аккумуляция и хранение легких газов в металлах и сплавах, проблема транспортировки водорода. С другой стороны, это связано с нежелательным воздействием водорода на свойства материалов (охрупчивание, коррозия, распространение трещин).

В технически чистых металлах ловушками, ответственными за захват атомов водорода, являются дефекты кристаллической решетки: точечные дефекты и их комплексы, дислокации, границы зерен, объемные дефекты. При этом большинство исследователей отмечают, что наиболее эффективными ловушками являются границы зерен, дислокации и вакансии [1]. На сегодняшний день остается открытым вопрос относительно количественной оценки сорбционной способности по отношению к водороду различных дефектов кристаллической решетки.

Настоящая работа посвящена расчету методом компьютерного моделирования структурно-энергетических характеристик примеси водорода вблизи решеточной вакансии и собственного междоузельного атома в ГЦК металлах Pd и Ni. Выбор металлов обусловлен повышенным вниманием к ним и относительно большим количеством полученных для них экспериментальных данных.

Расчетные блоки в компьютерной молекулярно-динамической модели включали 8400 атомов. Граничные условия использовались периодические. Точечный дефект вводился в центр расчетного блока: вакансия путем удаления одного атома, собственный междоузельный атом – путем введения «лишнего» атома с образованием гантельной конфигурации в направлении $\langle 100 \rangle$. После введения дефекта проводилась структурная релаксация, в течение которой атомная структура вблизи дефекта переходила в равновесное состояние. После этого в расчетный блок в область дефекта вводилось некоторое число атомов водорода и вновь проводилась структурная релаксация, в завершении которой расчетный блок охлаждался до 0 К для исключения влияния тепловых смещений атомов на расчет структурно-энергетических характеристик примеси водорода.

Шаг интегрирования по времени движения атомов в методе молекулярной динамики был равен 1 фс. Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клери-Розато [2]. Для описания взаимодействий H-H, Pd-H, Ni-H использовались потенциалы Морза. Параметры потенциалов Морза были взяты из работы [3], где они были рассчитаны с использованием экспериментальных данных по энергии абсорбции, энергии активации надбарьерной диффузии водорода в металле (при нормальных и высоких температурах), энергии связи с вакансией, дилатации.

Основными энергетическими характеристиками, описывающими взаимодействие водорода с точечными дефектами, являются энергия связи водорода с дефектом и энергия абсорбции водорода дефектом. Энергия связи водорода с точечным дефектом E_b рассчитывалась в настоящей работе как разность потенциальной энергии расчетного блока, содержащего дефект (вакансию или междоузельный атом) и атом водорода в октаэдрической поре на таком расстоянии друг от друга, которое исключает взаимодействие точечного дефекта и водорода, и потенциальной энергии расчетного блока, содержащего атом водорода в дефекте. В обоих случаях перед расчетом энергии расчетного блока проводилась динамическая релаксация, после которой расчетный блок охлаждался до 0 К.

Энергия абсорбции водорода дефектом – это работа, которую нужно затратить, чтобы поместить один атом водорода в область дефекта с учетом работы разрыва связи Н-Н в молекуле двухатомного водорода H_2 .

С увеличением числа введенных атомов водорода в вакансию энергия связи сначала постепенно уменьшается (рис.1), но, начиная с четырех атомов водорода, растет для Pd и остается примерно постоянной для Ni вплоть до двух десятков введенных атомов водорода в вакансию. График зависимости энергии абсорбции (рис. 1 б) коррелирует с зависимостью энергии связи от числа атомов водорода, указанные величины отличает только энергия абсорбции чистым кристаллом: $-0,1$ эВ для Pd и $0,16$ эВ для Ni.

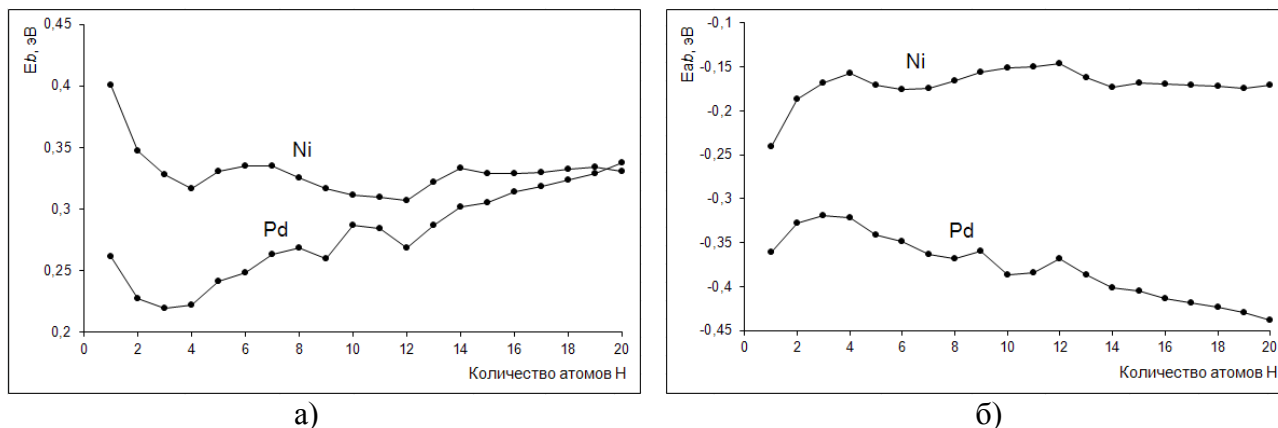


Рис. 1. Зависимости средней энергии связи атома водорода с вакансией E_b (а) и средней энергии абсорбции водорода вакансией E_{ab} (б) от количества атомов водорода при условии их упорядоченного расположения в вакансии.

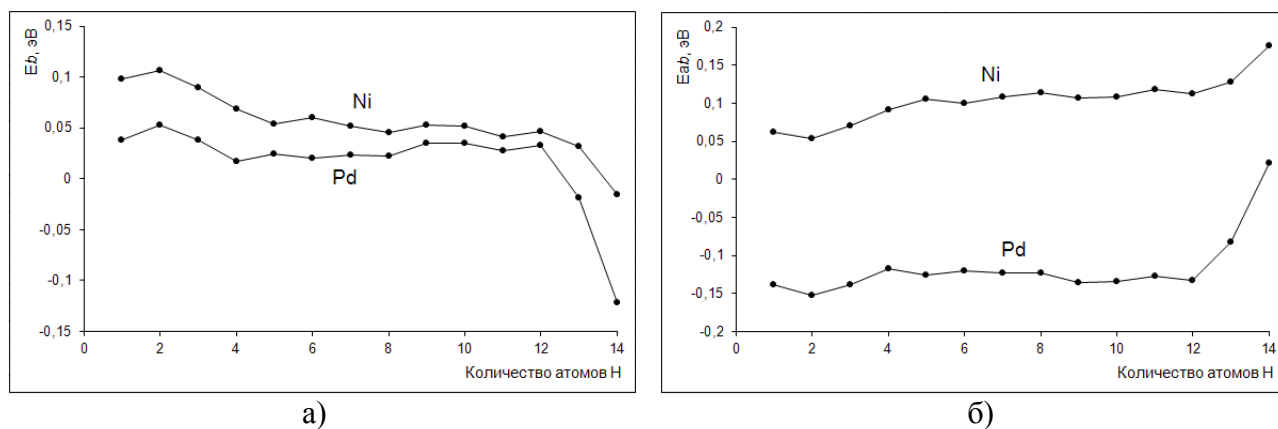


Рис.2. Зависимости средней энергии связи атома водорода с собственным междоузельным атомом E_b (а) и средней энергии абсорбции водорода междоузельным атомом E_{ab} (б) от количества атомов водорода при условии их упорядоченного расположения вблизи междоузельного атома.

Прежде всего, судя по графикам, можно сделать вывод, что вакансия является эффективной ловушкой для водорода. Энергия связи, т.е. работа помещения атома водорода из кристалла в вакансию, остается положительной, или даже растет для Pd, вплоть до содержания в этой вакансии более двух десятков атомов водорода, при условии, конечно, их упорядоченного расположения. Такое большое количество сорбируемых атомов водорода можно объяснить небольшими, относительно расстояния между атомами металла, равновесными расстояниями взаимодействий Н-Н в металлах, Pd-Н и Ni-Н, а также «мягкостью» потенциала взаимодействия Н-Н.

Зависимости энергии связи и энергии абсорбции от числа атомов водорода для междоузельного атома приведены на рис. 2. При введении одного атома водорода в

междоузельный атом (в центр гантели $\langle 100 \rangle$) были получены значения энергии связи E_b : 0,041 эВ для Pd и 0,095 эВ для Ni. Положительное значение энергии связи говорит о том, что междоузельный атом также может выступать в роли ловушки атомов водорода, однако не такой эффективной, как вакансия.

Положительное значение энергии связи сохраняется вплоть до 12 атомов водорода в области междоузельного атома (рис. 2 а). Как и в случае вакансии, энергия связи с ростом числа атомов водорода сначала падает, но, начиная с 4 введенных атомов, остается примерно постоянной до 12 атомов. Зависимость энергии абсорбции (рис. 2 б) коррелирует с зависимостью энергии связи. Но, в отличие от вакансии, для Ni энергия абсорбции водорода междоузельным атомом положительна, что снижает вероятность подобной сорбции.

Высокая сорбционная способность вакансий должна способствовать значительному влиянию их концентрации на общую сорбционную способность металла. Например, для чистого кристалла Ni энергия абсорбции положительна (0,16 эВ [1]), т.е. помещение водорода в кристалл Ni энергетически невыгодно и в состоянии термодинамического равновесия концентрация водорода в Ni невысокая, как правило, десятые доли процента [1]. Однако энергия абсорбции вакансией, согласно полученным данным, отрицательна и колеблется в пределах от -0,15 до -0,24 эВ. Это значит, что сорбционная способность таких металлов как Ni должна сильно зависеть от концентрации вакансий. Для Pd, для которого энергия абсорбции чистым кристаллом и так отрицательна (-0,1 эВ), влияние вакансий, по видимому, должно быть менее значительным. Наличие собственных междоузельных атомов, согласно полученным данным, слабее влияет на сорбционную способность металла по сравнению с вакансиями.

При введении в расчетный блок Pd или Ni, содержащего вакансию, относительно высокой концентрации водорода, через некоторое время, в зависимости от температуры, атомы водорода образовывали небольшой коагулянт в области вакансии. Подобные коагулянты, по всей видимости, оказывают влияние на подвижность вакансии, т.е. и на диффузионные характеристики металла.

Таким образом, с помощью метода молекулярной динамики в настоящей работе показано, что решеточные вакансии в таких металлах как Pd и Ni являются существенно более эффективными ловушками водорода по сравнению с собственными междоузельными атомами, способными с положительной энергией связи сорбировать большое количество (вплоть до двух десятков при упорядоченном расположении) атомов водорода. Атомы водорода в области точечного дефекта, как правило, стремятся образовать упорядоченную структуру в виде набора правильных многогранников.

Высокая сорбционная способность вакансий, по всей видимости, должна способствовать значительному влиянию их концентрации на общую сорбционную способность металла. Наличие собственных междоузельных атомов, согласно полученным результатам, слабее влияет на сорбционную способность металла по сравнению с вакансиями. Атомы водорода, захваченные в процессе диффузии вакансией, образуют в ее области коагулянт, который, по всей видимости, оказывает влияние на диффузионную подвижность самой вакансии, и, следовательно, на процессы (например, ползучесть), связанные с диффузией.

Список использованной литературы:

1. Взаимодействие водорода с металлами / Под. ред. Захарова А.П. М.: Наука, 1987. – 296 с.
2. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. - 1993. - V.48, №1. - P.22-33.
3. Полетаев Г.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Потенциалы межатомного взаимодействия в системах Pd-H и Ni-H // Химическая физика и мезоскопия. - 2011. - Т.13, №3. - С. 411-418.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ С МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕЙ Ni-Al

Санников А.В. - аспирант

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Согласно [1], мощным источником и стоком точечных дефектов в кристалле являются границы раздела, в том числе межфазные границы. Ранее, в работе [2], было проведено исследование взаимодействия точечных дефектов с границами кручения в Ni, Al, Cu, был проведен расчет энергии образования и энергии связи точечных дефектов с границами зерен. Автор отмечает, что точечные дефекты стремятся мигрировать в узел дислокационной сетки. Необходимо отметить, что в данной работе на границе кручения кристаллов наблюдались винтовые дислокации.

Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики взаимодействия точечных дефектов с межфазной границей Ni-Al и расчету энергии связи вакансии и междоузельного атома с дислокациями несоответствия и узлами дислокационной сетки. В работе рассматривались ориентации межфазной границы в плоскостях (100) и (111). В качестве металлической системы была взята система, состоящая из двух ГЦК металлов Ni и Al с параметрами решеток 3,52 и 4,05 Å соответственно. Значительное отличие параметров решеток приводит к формированию высокой плотности дислокаций несоответствия на границе раздела Ni-Al.

Межфазная граница создавалась в центре расчетного блока (рис.1). Плоскость границы имела ориентацию (100) или (111). Размеры блока подбирались таким образом, чтобы вдоль межфазной границы можно было использовать периодические граничные условия. То есть вдоль осей X и Y на рис.1 имитировалось бесконечное повторение расчетного блока. Вдоль оси Z были наложены жесткие условия, - атомам вблизи поверхностей расчетного блока, параллельных плоскости границы, в процессе компьютерного эксперимента не позволялось двигаться (на рис.1 жестко закрепленные атомы показаны темно-серым цветом). Количество атомов в расчетном блоке составляло от 25000 до 30000.

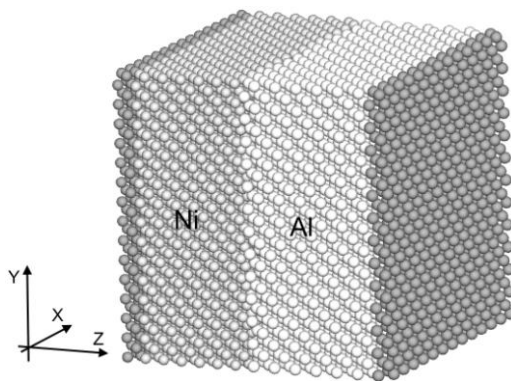


Рис.1. Расчетный блок с межфазной границей Ni-Al (100). Вдоль осей X и Y наложены периодические граничные условия. Атомам, окрашенным в темно-серый цвет, в процессе компьютерного эксперимента двигаться запрещалось (жесткие граничные условия вдоль оси Z).

Для приведения структуры расчетного блока в равновесное состояние (в данных условиях) проводилась структурная релаксация. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики варьировался от 5 до 10 фс. При описании межатомных взаимодействий использовались парные потенциалы Морза, параметры которых были взяты из работы [3].

В процессе структурной релаксации, в ходе которой происходило сопряжение фаз Ni и Al, на межфазной границе образовывались дислокации несоответствия (рис.2). Они возникали, как было уже сказано выше, в результате несоответствия параметров решеток

контактирующих фаз. На рис.2, где изображены распределения свободного объема в плоскости межфазной границы, отчетливо видны ядра дислокаций несоответствия, 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.

При расчете энергии связи точечных дефектов с межфазной границей Ni-Al проводился ввод вакансии и междоузельного атома в ядро дислокации, узел дислокационной сетки, в центр ячейки дислокационной сетки в каждую из фаз Ni и Al. После введения точечного дефекта проводилась структурная релаксация, в завершение которой расчетный блок охлаждался. Для исследования взаимодействия междоузельного атома с межфазной границей в расчетный блок вставлялась гантель $\langle 100 \rangle$.

Энергия связи точечного дефекта с межфазной границей – это работа, которую необходимо затратить, чтобы удалить данный дефект из границы в объем кристалла.

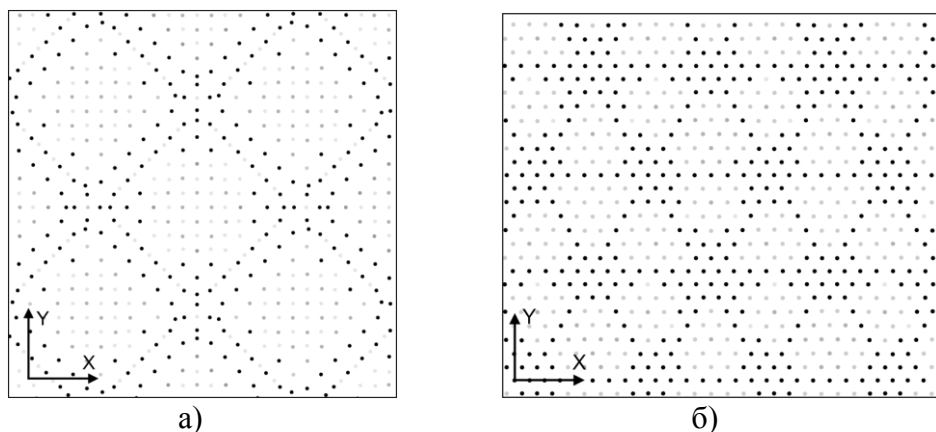


Рис.2. Изображение дислокаций несоответствия на границах Ni-Al (100) (а) и (111) (б) с помощью визуализатора свободного объема (чем темнее атом, тем больше вокруг него свободного объема).

В таблице 1 приведены значения энергии связи вакансии с межфазной границей. В таблице 2 приведены значения энергии связи междоузельного атома с межфазной границей.

Таблица 1. Энергия связи вакансии с межфазной границей, эВ

Место введения дефекта	граница (100), эВ		граница (111), эВ	
	Al	Ni	Al	Ni
ядро дислокации	2,51	2,35	-0,77	2,01
узел дислокационной сетки	6,25	6,72	0,61	3,19
центр ячейки дислокационной сетки	0,93	1,91	-0,78	2,01

Таблица 2. Энергия связи междоузельного атома с межфазной границей, эВ

Место введения дефекта	граница (100), эВ		граница (111), эВ	
	Al	Ni	Al	Ni
ядро дислокации	3,05	5,99	3,43	3,42
узел дислокационной сетки	5,21	7,23	3,44	5,43
центр ячейки	3,80	5,41	3,27	5,19

дислокационной сетки				
-------------------------	--	--	--	--

Согласно данным, приведенным в таблицах 1 и 2, лучшим стоком для точечных дефектов является граница (100).

В ходе моделирования с помощью визуализатора атомных смещений относительно начальных положений было выяснено, что в большинстве случаев точечные дефекты при вставке в ядро дислокации мигрировали в узел дислокационной сетки, а при вставке в центр ячейки – в ядро дислокации либо узел дислокационной сетки. При этом положение самих ядер дислокации несколько изменялось. На рис.3 изображены атомные смещения. Серая штриховая линия – примерное положение дислокаций.

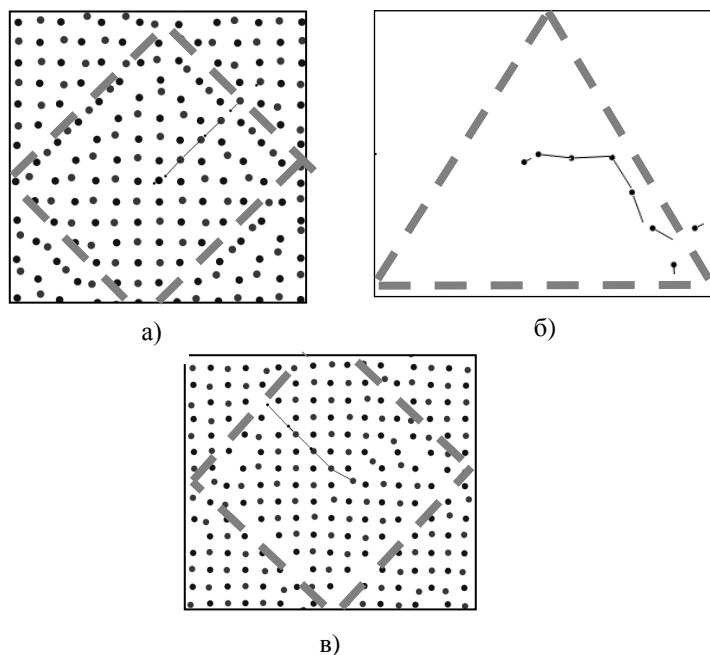


Рис.3. Миграция точечных дефектов: а) миграция междоузельного атома из центра ячейки, (100); б) миграция междоузельного атома из центра ячейки, (111); в) миграция вакансии из центра ячейки, (100).

Список использованной литературы:

1. Бокштейн Б.С. Атомы блуждают по кристаллу. М.: Наука, 1984. 208с.
2. Мартынов А.Н. Исследование атомных механизмов структурных превращений вблизи границ зерен кручения в ГЦК металлах. Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.наук. Барнаул, АлтГТУ, 2011.
3. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная структура АФГ и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой L12 // ФММ. 1984. Т.58, №2. С. 336-343.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИГРАЦИИ ГРАНИЦ НАКЛОНА В НИКЕЛЕ

Ламов П.В. – старший преподаватель, Преснов М.А. – магистрант

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Изучение миграционной подвижности межзеренных границ является весьма актуальным вопросом теории рекристаллизации. Миграция границ играет существенную роль в процессах пластической деформации поликристаллических материалов. Она также является основным механизмом релаксации неравновесной структуры нанокристаллических материалов, особенно в свежеприготовленных образцах.

В данной работе проводились исследования методом молекулярной динамики зависимости скорости миграции границ наклона в Ni от температуры и угла разориентации в двумерной модели. Для описания межатомных взаимодействий в настоящей работе использовался парный потенциал Морза:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (e^{-\alpha r_{ij}} - 2) \quad (1)$$

Здесь D – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, $\beta = e^{\alpha r_0}$, r_0 – некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами, r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами.

Параметры потенциалов Морзе были взяты из работы [1]. Численные значения потенциалов для различных металлов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры потенциала Морзе для Al, Ni и Cu

Металл	$\alpha, \text{\AA}^{-1}$	B	D, эВ
Al	1.015315	30.30151	0.277638
Ni	1.362768	44.37877	0.432057
Cu	1.334205	44.87264	0.342335

В работе были рассмотрены зависимости миграции границы наклона от температуры и от угла наклона. Размеры блока – 40x50 атом. Количество атомов составляло 1944. Граничные условия задавались вдоль одной оси периодические, с одной стороны жесткие (для фиксации структуры одного из зерен), с другой - свободные. Температура варьировалась от 600 до 1700 К, угол разориентации зерен – от 7° до 28°. Продолжительность компьютерных экспериментов составляла 200 пс. Временной шаг одной итерации в методе молекулярной динамики был равен 0,01 пс.

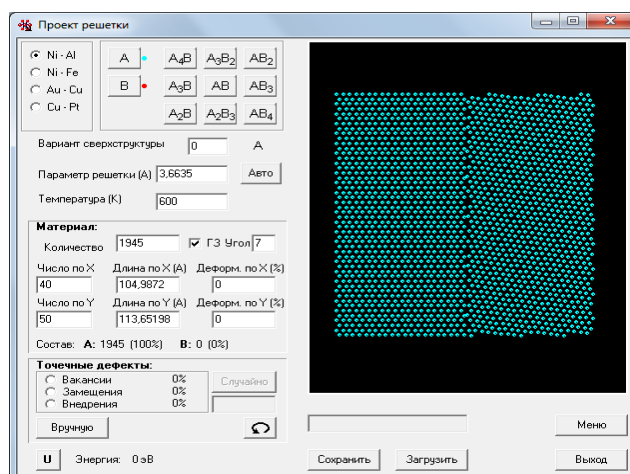


Рис.1. Интерфейс программы MD2.

Каждый опыт проводился по 3 раза с неизменными параметрами. На рис.1 показан проект решетки использованной для проведения опытов.

При проведении опытов наблюдалось как граница наклона мигрирует за пределы расчетного блока. Опыт завершался, как только граница полностью покидала расчетный блок (рис.2).

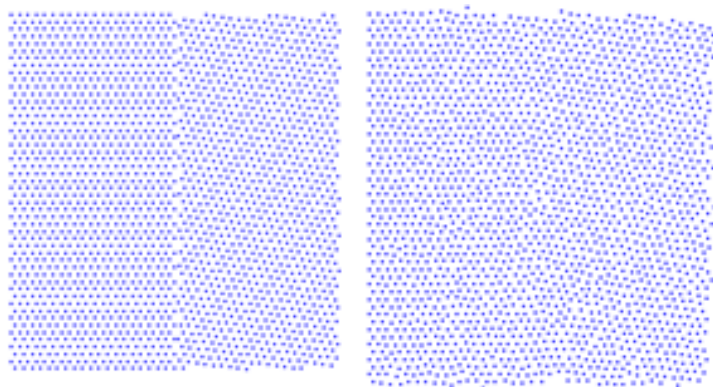


Рис.2. Выравнивание границы наклона в процессе мигрирования под действием температуры.

На рис.3 показана начальная конфигурация с последующими атомными смещениями, с помощью него было определена траектория движения атомов под действием температуры.

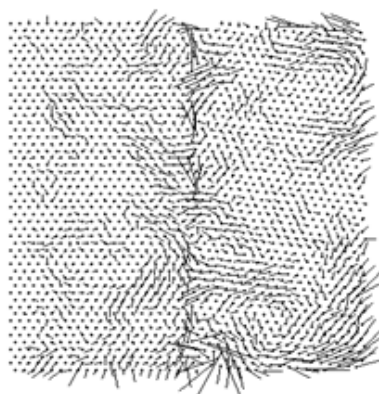


Рис.3. Миграция малоугловой границы под действием температуры путем образования вихревых кооперативных смещений атомов.

Зависимость скоростей миграции границ от температуры для углов наклона 7° и 14° показана на рис.4.

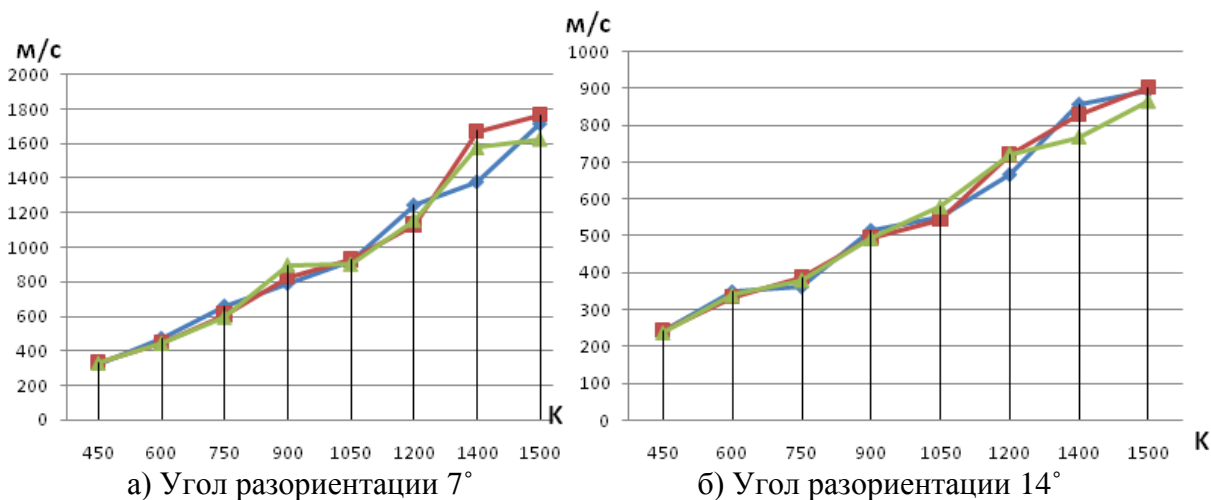


Рис.4. Зависимость скоростей миграции от температуры малоугловых границ зерен никеля.

На рис.5 представлены результаты сравнительных исследований миграции малоугловых и большеугловых границ наклона в Ni зависимости скорости от угла разориентации, температура в опыте была постоянной (1200К).

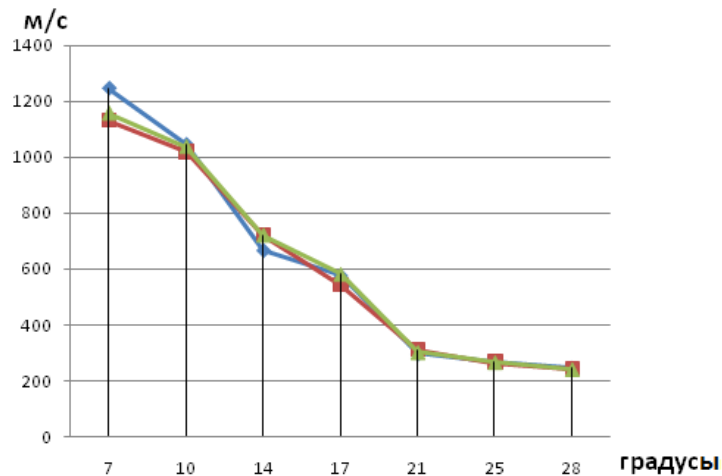


Рис.5. Зависимость скорости миграции границы от угла наклона.

Таким образом, в данной работе проведено исследование методом молекулярной динамики зависимости скорости миграции границ наклона в Ni от температуры и угла разориентации в двумерной модели. Получены следующие основные результаты:

- 1) С ростом температуры скорость миграции границы зерен увеличивается.
- 2) Скорость миграции малоугловых границ наклона при температуре 1200К выше, чем большеугловых.
- 3) Миграция малоугловых границ осуществляется путем образования вихревых кооперативных смещений атомов. Периодичность образования вихревых смещений совпадает с периодичностью зернограницных дислокаций.

Список использованной литературы:

1. Полетаев Г.М., Юрьев А.Б., Громов В.Е., Старостенков М.Д. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах и интерметаллиде Ni₃Al. - Новокузнецк: изд-во СибГИУ, 2008. - 160 с.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПОРЯДОК-БЕСПОРЯДОК В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ

Нояк Д.В. – студент

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Фазовые переходы порядок-беспорядок (ФППБ) являются типичными и весьма распространенными видами фазовых превращений. К настоящему моменту установлено, что ФППБ могут быть первого и второго рода. Например, для превращения $B2 \leftrightarrow A2$ чаще характерен ФП второго рода (CuZn, AgZn, FeCo), для превращения $L1_2 \leftrightarrow A1$ (Cu₃Au, Pt₃Co, Ni₃Fe, Pd₃Fe, Au₃Cu, Fe₃Pt) - исключительно превращения первого рода, протекающие через двухфазную область. Экспериментальные исследования изменения тонкой структуры связаны со значительными трудностями, поэтому в последнее время это превращение исследуется в рамках компьютерного эксперимента. Детальный анализ изменения атомной структуры материала, позволяет выявить особенности протекания ФППБ в различных системах.

В работе рассматривается модельный сплав CuZn, испытывающий ФППБ второго рода. При этом исследуется эволюция атомной структуры бинарного бинарной тонкой пленки, соответствующей двумерному срезу ОЦК - кристалла в ориентации $\{011\}$.

Для проведения эксперимента используется модель диффузии атомов по вакантным узлам кристаллической решетки. Атомы обоих компонентов располагаются в узлах двумерной кристаллической решетки в соответствии с заданными концентрациями. Часть узлов, определяемая концентрацией вакансий C_V , остается свободной. Для удобства вакансии считаются атомами третьего сорта V.

Для упрощения предлагаемой модели вводятся следующие ограничения. Во-первых, полагаем, что статистические смещения и колебания атомов относительно узлов кристаллической решетки отсутствуют, то есть, моделируемый сплав имеет жесткую решетку и не учитывается влияние, которое оказывает изменение постоянной решетки при изменении состава сплава, порядка и температуры на энергии взаимодействия пар атомов. Во-вторых, полагаем также, что влияние несоизмерности атомов различных сортов, а следовательно, и влияние внутренних локальных напряжений не существенно.

Любой атом решетки взаимодействует с атомами, лежащими в двух первых координационных сферах. Естественно принять при этом, что во взаимодействие атомов основной вклад дают энергии связи пар атомов $\varphi_{\alpha\beta}(r_i)$, зависящие от расстояния между взаимодействующими атомами r_i (иначе от радиуса координационной сферы) и сортности рассматриваемых атомов. Вклад многочастичного взаимодействия незначителен. Энергия сплава определяется только конфигурационной частью.

Такие приближения с одной стороны огрубляют модель, однако, с другой стороны упрощение модели позволяют отделить влияние различных факторов и уменьшить число параметров модели.

Компьютерный эксперимент не позволяет рассматривать большие (макроскопические) размеры кристаллов. Но при этом объем блока должен быть достаточен для адекватного представления макрообъема (объема реальных кристаллов) и сведения к разумному минимуму влияния дискретности модели. Для того чтобы результаты, получаемые для малого кристалла, можно было сравнивать с экспериментом, для границы расчетной области формулируются периодические условия "сшивания" микрокристалла с внешним объемом. Периодические граничные условия позволяют имитировать бесконечную протяженность кристалла. Толщина граничной области зависит от радиуса действия используемых потенциалов взаимодействия.

В серии компьютерных экспериментов моделируется изотермический отжиг материала, причем задаваемая температура не только неизменна в процессе отжига, но и одинакова во всем образце. В кристалле задается распределение температуры $T(x, y, t) = \text{const}$. Исходная структура материала задавалась в соответствии с задачей идеально упорядоченной.

Как и любое физическое явление атомное упорядочение по диффузионному механизму можно рассматривать как вероятностное. Уподобим его случайному процессу, протекающему во времени и пространстве, выделив элементарное событие, вероятностные характеристики которого легко определяются.

В качестве элементарного события рассматривается обмен атомов местами. При этом считаем, что изменение состояния системы возможно только в дискретные моменты времени, а вероятности перескока атомов зависит от трех факторов: температуры, энергии и взаимное расположения диффундирующих атомов. Причем, вероятности перехода атома в рассматриваемый узел тем больше, чем к большему выигрышу (меньшему проигрышу) энергии это приводит. Кроме того, при низких температурах основную роль играет энергетический фактор, а рост температуры приводит к ослаблению влияния энергетики: вероятности перескока разнородных атомов, окружающих рассматриваемый атом, при этом выравниваются.

В рамках используемой модели исследуется, во-первых, термоактивируемое разупорядочение. Во-вторых, предполагается изучения влияние на специфику такого рода процессов концентрации вакансий и др. Модель может быть расширена на область гетерофазных материалов, например, тонкопленочных композитов и др., одна из задач исследования – поведение межфазных границ в условиях нагревания материала, оценка их стабильности.