

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРБИТАЛЬНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ В КЛАСТЕРАХ

Попов В. В. – аспирант, Кантор С. А. – к.ф.-м.н., доцент  
Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

Современная теория несамосопряженных операторов еще далека от той степени завершенности, которая позволяет включать ее в физические учебники. Уже поэтому создание такой теории является весьма актуальной задачей. Не менее важным является и применение этой теории к описанию открытых систем, систем с поглощением и излучением. Применение несамосопряженных операторов позволяет на качественно новом уровне выполнять моделирование процессов, протекающих в открытых системах, в рамках единой *ab initio* схемы рассчитывать большую совокупность различных свойств материала, получать достаточно полное представление о свойствах вещества, даже еще не синтезированного. При этом большое внимание важно уделить именно количественному расчету, т. к. явления и процессы, происходящие в открытых системах, определяются большим количеством конкурирующих факторов, не позволяющих ограничиться качественными соображениями.

Окружающий нас мир представим как совокупность открытых систем, включающих в себя атомы, молекулы, кластеры. Самоорганизованная агрегация атомов, молекул, кластеров является естественной в живой природе. В неживой природе целенаправленное создание наноструктурных материалов в режиме «самосборки» требует очень глубокого и достаточно полного представления о взаимодействии атомов, молекул и кластеров. По своим физическо-химическим свойствам кластеры занимают промежуточное положение между атомами и молекулами с одной стороны и конденсированным веществом – с другой. Эволюция кластеров ведет к образованию либо газовой фазы, либо конденсированной фазы, проходя ряд метастабильных состояний. Кластеры обладают высокой химической активностью, а цепь процессов перехода от одного состояния к другому является сложной и неравновесной. Еще более сложные процессы взаимодействия кластеров происходят в условиях внешних воздействий, с помощью которых можно и управлять этими процессами [1, 2].

Целью работы является развитие и применение теории несамосопряженных операторов для описания орбитальных возбуждений атомных систем с использованием методов компьютерного моделирования. Практическая реализация этой теории направлена на создание термоэмиссионных, фотоэлектрических и плазменных преобразователей энергии с более высокими значениями КПД по сравнению с КПД современных устройств прямого преобразования тепловой и световой энергии в электрическую. Для оптимизации таких преобразователей часто требуются данные об элементарных процессах, происходящих в веществе [3]. Объектом исследования мы выбрали натрий. В качестве буферных газов – гелий и неон.

В качестве базовой мы использовали теорию функционала электронной плотности, изначально предназначенную для описания основного состояния. Проведено обобщение этой теории для описания одноэлектронных возбуждений, учитывающих ширину энергетических уровней. Идея учитывать ширину энергетических уровней впервые использовалась в [4] при вычислении возбужденных волновых функций в атоме водорода. Описание возбужденных состояний многоэлектронных атомов предложено в [5]. В настоящей работе проведено обобщение этой идеи для описания возбужденных состояний в кластерах.

Нами выполнены самосогласованные расчеты спектров и полных энергий электронов в атомах, двух-, трех- и четырехатомных кластерах натрия, гелия и неона при различных расстояниях между атомами. Задача на собственные значения эффективного одночастичного уравнения Кона-Шема с обменно-корреляционными потенциалами различного вида решалась методом Рутана в базисе гауссовых функций [6]. С помощью численного моделирования показано, что атом натрия, помещенный в поле большой интенсивности, сравнимое с интенсивностью поля в самом атоме, может перейти в возбужденное состояние с полной энергией, большей энергии основного состояния, и пребывать в таком состоянии

неограниченно долго. Атом натрия, помещенный в поле большой интенсивности, сравнимое с интенсивностью поля в самом атоме, может перейти в возбужденное состояние с полной энергией, как большей, так и меньшей энергии основного состояния, и пребывать в таком состоянии неограниченно долго. Обнаружены неограниченно долго живущие возбуждения в полях реально достижимых интенсивностей в системе Na-Na при расстояниях между атомами порядка 4 и 11 боровских радиусов, в системе Na-He – при расстояниях между атомами порядка 5.5, 3.3 и 2.5 боровских радиусов, в системе Na-Ne – при расстояниях между атомами порядка 4 боровских радиусов.

Отметим, что использование приближения локальной плотности с различными обменно-корреляционными потенциалами в теории функционала электронной плотности [7-9] приводит лишь к несущественным количественным изменениям. Качественное поведение спектральных линий, полных энергий и межатомные расстояния долгоживущих возбуждений остаются неизменными. Столь необычное вышеописанное поведение атомов натрия в атмосфере гелия и неона вполне объясняется сильными корреляциями ферми систем [10] в поле внешних возбуждений.

#### Цитированная литература

1. Слабко В. В., Хачатрян Г. Г., Александровский А. С. Управляемая внешним световым полем самоорганизованная агрегация малых металлических частиц. // Письма в ЖЭТФ, т. 84, с. 360 (2006).
2. Балыкин В. И. Атомно-проекторная параллельная фабрикация наноструктур. // УФН, т. 177, с. 780 (2007).
3. Горбунов Н.А., Flamant G. Качественная модель плазменного фотоэлектрического преобразователя. // ЖТФ, т. 79, с. 72 (2009).
4. Янавичус А., Шучуров В. Водородные волновые функции, учитывающие ширину уровня. // Литовский физический сборник, т. 8, с. 47 (1968).
5. Попов А.В. Решение спектральной задачи для электронов в атоме, учитывающей ширину энергетических уровней. // Оптика и спектроскопия, т. 93, с. 5 (2002).
6. Huzinaga S. Gaussian-type functions for polyatomic systems. I. // J. Chem. Phys., v. 42, p.1293 (1965).
7. Barth von U., Hedin L. A local exchange-correlation potential for the spin-polarized case. // J. Phys. C., v.5, p.1629 (1972).
8. Vosko S. H., Wilk L., Nusair M. Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculation. // Canad. J. Phys., v. 58, p. 1200 (1980).
9. Perdew J. P., Wang L. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. // Phys. Rev. B, v. 45, p. 13244 (1992).
10. Шагинян В.Р., Амусья М.Я., Попов К.Г. Универсальное поведение сильнокоррелированных ферми-систем. // УФН, т. 177, с. 585 (2007).

## ОСНОВНЫЕ ПРОБЛЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Кротова. А. О – студент, Полетаев. Г. М. – доцент, Старостенков М. Д.  
Алтайский Государственный Технический Университет им. И. И. Ползунова

В настоящее время в физике конденсированного состояния, наряду с теорией и экспериментом, все более интенсивно используется компьютерное моделирование. Компьютерное моделирование позволяет проводить исследования и прогнозировать процессы в материалах на макро-, мезо- и микроуровнях. При этом наибольший интерес, как правило, представляет моделирование на атомном уровне, так как с ним связаны наибольшие сложности проведения исследований с помощью прямых экспериментов. В большинстве случаев прямые исследования процессов и явлений, происходящих на атомном уровне, проводятся по косвенным данным и зачастую содержат элемент гипотетичности. Особенно это касается быстропротекающих процессов с выделением большого количества энергии (ионная имплантация, СВС, взрывы и т.д.) и длительных по времени процессов (упорядочение сплавов, диффузия и т.д.). Компьютерное моделирование в свою очередь дает возможность 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.

Молекулярно-динамический эксперимент содержит следующие этапы. В первую очередь строится начальная структура расчетного блока: задаются объем блока ( $10^3$ - $10^6$  атомов) и начальные координаты атомов. На этом же этапе обычно задается температура посредством задания соответствующих начальных скоростей или смещений атомов. Следующий этап, и основной, заключается в расчете траекторий движения каждого атома в расчетном блоке. Для этого находят смещения атомов за короткие промежутки времени (порядка  $10^{-13}$ - $10^{-15}$  с – шаг интегрирования по времени). Чтобы определить скорости и смещения атомов, необходимо знать силы взаимодействия между ними. Силы определяются с помощью выбранных для данной модели потенциальных функций межатомного взаимодействия. При расчете взаимодействий атомов на границы расчетного блока накладывают различные, зависящие от поставленной задачи, граничные условия (периодические, жесткие, гибкие, вязкие или свободные). В процессе компьютерного эксперимента проводится слежение за различными характеристиками (температурой, свободным объемом, коэффициентом диффузии, давлением и т.д.), а также, когда требуется исследовать динамику атомной структуры, через некоторые интервалы времени запоминается структура расчетного блока. Исследование с использованием различных вспомогательных модулей компьютерной программы, отвечающих за визуализацию структуры, построение графиков, расчет требуемых параметров, можно отнести к третьему этапу молекулярно-динамического моделирования.

При стремлении к более достоверному и разностороннему исследованию с помощью метода молекулярной динамики приходится сталкиваться с проблемами, которые можно свести к четырем основным: реалистичность потенциала межатомных взаимодействий, скорость счета (скорость выполнения эксперимента на компьютере), погрешности счета, наглядность и разнообразие визуализаторов структуры расчетного блока.

Одним из основных условий успеха моделирования процессов на атомном уровне является корректное описание межатомного взаимодействия. Для определения потенциальной функции взаимодействия атомов существуют теоретические методы, основанные на приближенном решении квантовомеханической задачи вычисления энергии кристалла, эмпирические и полуэмпирические, в которых потенциал задается в виде некоторой функции (Борна-Майера, Леннард-Джонса, Морза, Ми-Грюнайзена, различные степенные функции и т.д.) с набором параметров, подбираемых по справочным величинам для данного материала. Существуют также комбинации первопринципного и потенциального подхода, такие как метод функционала электронной плотности. Точность

потенциала, как правило, связана с его сложностью и скоростью выполнения компьютерного эксперимента. Поэтому, несмотря на большое разнообразие существующих методов описания межатомных взаимодействий, вопрос поиска оптимальной потенциальной функции остается открытым. Выбор типа потенциала в каждом отдельном случае зависит от метода компьютерного моделирования и поставленной задачи.

Следующей основной проблемой молекулярно-динамического моделирования является скорость счета на компьютере. Высокая скорость счета позволяет проводить более длительные эксперименты или большее их число, увеличивать объем расчетного блока, использовать более сложные и реалистичные потенциалы межатомного взаимодействия. Таким образом, скорость счета косвенно влияет и на погрешность компьютерных экспериментов. В настоящее время существует несколько приемов увеличения скорости счета: 1) уменьшение объема расчетного блока (недостаток – уменьшается реалистичность модели, увеличивается погрешность расчета различных структурно-энергетических характеристик); 2) увеличение шага интегрирования по времени (недостаток – значительно увеличивается погрешность расчета траекторий движения атомов в рамках используемых потенциала и численного метода интегрирования); 3) упрощение функции потенциала, табулирование потенциала, введение, так называемого, “радиуса обрезания” потенциала (сила взаимодействия быстро уменьшается с расстоянием между атомами, поэтому взаимодействие с удаленными атомами учитывать необязательно); 4) оптимизация программного кода – избавление от лишних функций в основном цикле компьютерной программы (цикле перебора всех атомов при расчете их взаимодействий и смещений); 5) в случае использования парных потенциалов расчет силы взаимодействия двух атомов производится только один раз (силы взаимодействия пары атомов равны по модулю и противоположны по направлению); 6) разбиение объема расчетного блока на ячейки с присвоением им номера, – при расчете сил взаимодействия атомов нет необходимости перебирать вновь все атомы расчетного блока, чтобы выяснить какие из них находятся внутри радиуса действия потенциала (“радиуса обрезания”), для этого достаточно рассмотреть только атомы, находящиеся в соседних ячейках; 7) ускорение счета путем параллельной обработки данных некоторым числом процессоров (совместное решение одной задачи несколькими компьютерами).

Третья проблема молекулярно-динамических моделей – погрешности, возникающие при вычислении траекторий движения атомов в процессе эксперимента, погрешности счета. Они обусловлены либо численным методом, который используется для решения уравнений движения, либо тем, что переменные величины округляются в компьютерной программе до определенного знака после запятой. Ошибки дискретизации, возникающие при решении уравнений движения, можно уменьшить, применяя численные методы более высоких порядков, чем метод Эйлера, например, методы Рунге-Кутты. Кроме того, погрешности можно снизить с помощью уменьшения шага интегрирования по времени, увеличения продолжительности компьютерных экспериментов, количества опытов или объема расчетного блока. Однако следует заметить, что все перечисленные средства повышают время, затрачиваемое на компьютерные эксперименты.

Даже при высокой скорости счета и реалистичности молекулярно-динамической модели довольно проблематично проводить исследования динамики атомной структуры без наглядных визуализаторов структуры расчетного блока. Правильный и разносторонний подбор визуализаторов гарантирует более детальное исследование. Каждая задача молекулярной динамики требует индивидуального подхода и специализированной визуализации структуры, поэтому способов визуализации на данный момент существует достаточно много. Можно выделить три основных типа визуализации: с помощью построения графиков и диаграмм, отражающих структурно-зависящие параметры (диаграммы радиального распределения, фазового состава, кристаллографической ориентации, распределение интенсивности диффузии и т.д.); двумерные сечения трехмерной модели или визуализаторы структуры двумерных моделей (области сжатия и растяжения,

распределение потенциальной энергии, распределение фаз, картина плотноупакованных атомных рядов, траектории и смещения атомов в двумерных моделях и т.д.); трехмерные визуализации (атомные смещения, визуализация дефектных областей с помощью отображения не соответствующих идеальному кристаллу потенциальной энергии и свободного объема, закрашивание областей определенного фазового состава и т.д.).

## ЭНЕРГИЯ НЕСИММЕТРИЧНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В АЛЮМИНИИ Драгунов А.С. – аспирант, Адарич Н.В. – аспирант, Пономаренко И.В. – аспирант Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

Большинство используемых на практике металлических конструкционных материалов имеет поликристаллическое строение. Основными структурными элементами таких материалов являются внутренние поверхности раздела (границы зерен). В настоящее время общепризнанно, что границы зерен (ГЗ) играют важную роль в обеспечении механических и многих других физических свойств кристаллических твердых тел. Однако это влияние неоднозначно и зависит от особенностей строения этих поверхностей. Знание о строении поверхностей раздела, их энергетических характеристик и процессов перестройки весьма важны для создания материалов с заранее запланированными свойствами.

Исследование границ зерен экспериментальными методами в настоящее время не дают полной картины о строения данных элементов поликристаллического материала. В связи с этим исследование методами компьютерного моделирования приобретают важное значение. Поскольку ГЗ являются весьма сложными и специфическими дефектами, для их моделирования необходимо создание специальных компьютерных программ.

В настоящей работе представлены результаты компьютерного моделирования зависимости энергии ГЗ от угла разориентации зерен, образующих границу. Исследовались как симметричные так и несимметричные ГЗ наклона с осью разориентации [100] в алюминии. Межатомное взаимодействие аппроксимировалось парным потенциалом Морза. Параметры потенциала определялись используя экспериментальные значения постоянной решетки, модулей упругости и энергии сублимации для алюминия. Процедура нахождения параметров потенциала описана в работе [1].

Кристалл, содержащий ГЗ, строился из идеального кристалла путем разворота половинок кристалла на требуемые углы и удаления атомов одной из взаимопроникающих решеток таким образом, чтобы образовывалась граница. Ось поворота [100] была выбрана вдоль узловой прямой проходящей через совпадающие узлы двух разориентированных решеток. При анализе структуры, совпадающий узел служит началом отсчета.

Модельный бикристалл, используемый для расчетов энергии, содержит расчетную ячейку, имеющую размер вдоль оси поворота равный  $16 \cdot a$  ( $a$  - параметр решетки алюминия), вдоль плоскости дефекта перпендикулярно оси разориентации  $80 \cdot a$ , вдоль нормали к плоскости ГЗ  $50 \cdot a$ . Вдоль всех осей использовались жесткие граничные условия. Энергия ГЗ определялась как разность идеального кристалла и кристалла с дефектом. При расчетах энергии радиус межатомного взаимодействия ограничивался третьей координационной сферой.

В случае аperiodической структуры, которая наиболее часто встречается в общих ГЗ, рассчитанная энергия имеет смысл средней энергии, определенной на некотором участке дефекта. Средняя энергия определялась с учетом всей площади расчетной ячейки.

Минимизации энергии состояла из двух этапов вакансионной и атомной релаксационных процедур. При этом использовалась оригинальная методика,

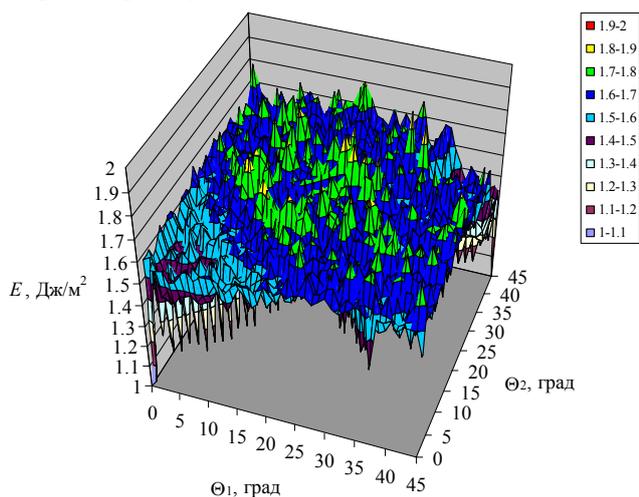


Рис. 1. Зависимость зернограничной энергии от углов поворота зерен после проведения вакансионной релаксации

разработанная авторами описанная в работах [2, 3]. Углы поворота соседних кристаллитов варьировались в пределах от  $0^\circ$  до  $45^\circ$  с интервалом  $1^\circ$ . Для уменьшения времени расчета атомная релаксация была ограничено сорока шагами, что является достаточным для установления зависимостей зернограничной энергии от угла поворота. На рис.1 представлена зависимость зернограничной энергии от углов поворота после проведения вакансионной релаксации. Энергия границ изменяется в пределах от 1 Дж/м<sup>2</sup> до 1,9 Дж/м<sup>2</sup>. Высокие значения зернограничной энергии и резко осциллирующий характер  $\gamma$ -поверхности обусловлен тем, что проведение процедуры удаления атомов является недостаточным для определения устойчивых конфигураций границ.

Проведение атомной релаксации, которая заключается в смещении атомов из узлов кристаллической решетки, позволяет существенно понизить значение зернограничной энергии. На рис. 2. представлена  $\gamma$ -поверхность зернограничной энергии после проведения процедуры атомной релаксации. Зависимость имеет вид поверхности с явно выраженным максимумом соответствующий углам разориентации соседних зерен  $45^\circ$ . К особенностям зависимости энергии можно отнести тот факт, что энергия практически не зависит от плоскости залегания границы, а определяется, главным образом углом разориентации соседних зерен. Однако зависимости симметричных границ несколько ниже, чем для несимметричных.

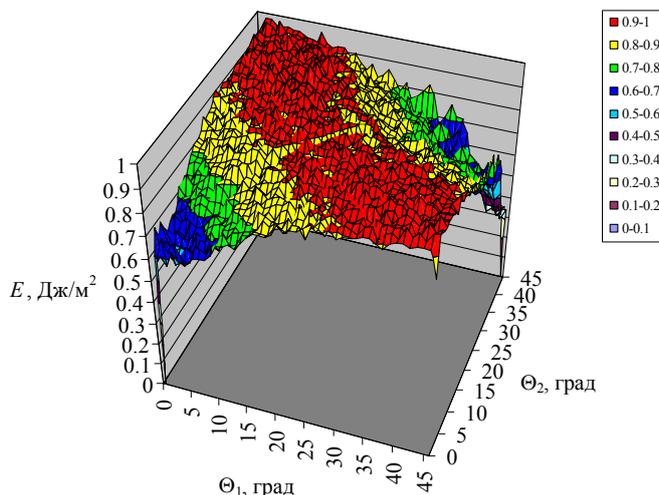


Рис. 2. Зависимость зернограничной энергии от углов поворота зерен после проведения атомной релаксации

На рисунке 3 представлена зависимость среднего значения энергии от угла разориентации зерен. Зависимость имеет вид гладкой кривой, монотонно возрастающей в пределах угла разориентации от  $0^\circ$  до  $45^\circ$  и монотонно убывающей в пределах угла разориентации от  $45^\circ$  до  $90^\circ$ , что соответствует зависимости рассчитанной в дислокационной модели Ван-дер-Мерве [4]. Нарушение монотонности наблюдается для малых углов, что очевидно связано с ограниченной длиной расчетной ячейки. Заметное отклонение энергии границ с углом разориентации  $\Theta=37^\circ$ , который близок к углу разориентации специальной границы  $\Sigma 5$  (013), имеющей значение  $\Theta=36,87^\circ$ , видимо связано с особенностями строения данных границ.



Рис. 3. Зависимость средних значений зернограничной энергии от угла разориентации зерен

## Литература

1. Козлов Э.В., Попов Л.Е., Старостенков М.Д. Расчет потенциала Морза для твердого золота. Изв. вузов. Физика, 1972, №3, с.107-108.
2. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Векман А.В. Малоугловые границы зерен в упорядоченном сплаве CuAu // Поверхность. – 2000. – №4. – С.54-58
3. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Weckman A.V. Influence of a misorientation angle on an energy of the symmetric grain boundary in fcc metals // Acta Metallurgica Sinica (English Letters). – 2000. – V.13, №2. – P.540-545.

4. Van der Merve J.H. On the stresses and energies associated with intercrystalline boundaries. Proc. of the Phys. Soc. A, 1950, v.60, p.616-637.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ СКОЛЬЖЕНИЯ В НАНОКРИСТАЛЛЕ Al

Ракитин Р.Ю.<sup>1</sup> – к.ф-м.н., доцент, Харина Е.Г.<sup>2</sup> – аспирант

<sup>1</sup>Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

<sup>2</sup>Кузбасская государственная педагогическая академия (г. Новокузнецк)

Исследование энергетических характеристик металлов является сложной задачей. Классический эксперимент с использованием электронной микроскопии, рентгенографии не всегда позволяет достичь нужной точности наблюдения при выявлении энергетических и структурных характеристик. В настоящее время наиболее оптимальными для подобного рода исследований являются методы молекулярной динамики. Используя данные методы можно рассчитывать энергию границ и проводить отбор стабильных структур из многочисленных геометрических вариантов. В более ранних работах структурно-энергетический анализ границ зерен наклона осуществлялся методом вариационной квазистатики [1]. В данной работе исследование энергетической структуры металлических систем проводилось методом

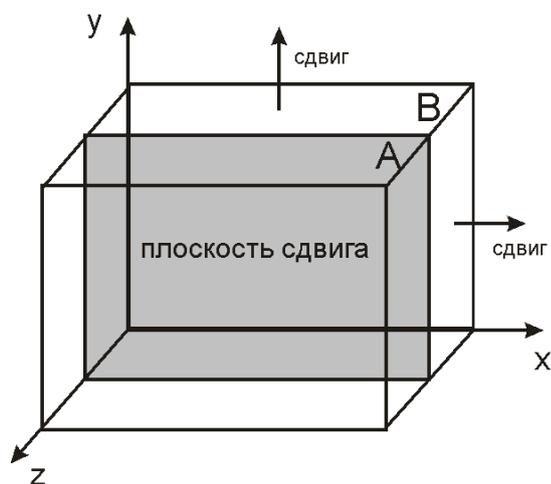


Рис. 1. Ориентация координатных осей в кристалле

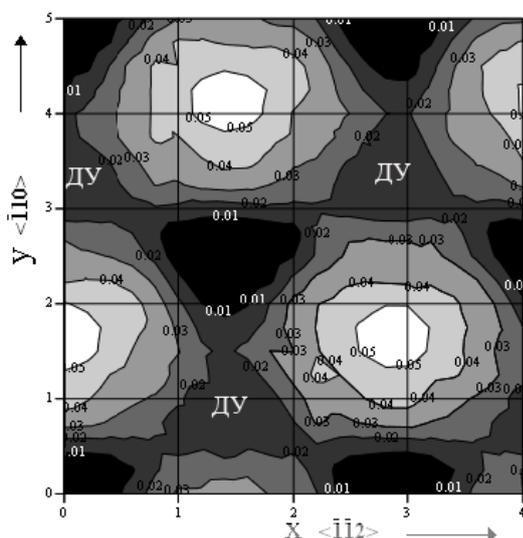


Рис. 2. Проекция  $\gamma$ -поверхности на плоскость (100) в модели жестких сфер

молекулярной динамики, при помощи компьютерной программы «Границы зерен в металлах» [2].

В задачах по моделированию атомной структуры дефектных кристаллов одной из основных проблем является поиск надежного способа описания межатомных связей в кристаллической решетке. Использование первопринципных подходов не всегда является возможным вследствие их сложности. В методе молекулярной динамики для описания взаимодействия чаще используются парные межатомные потенциалы. В настоящей работе взаимодействие описывалось с использованием потенциала Морзе [3].

В ходе компьютерного эксперимента, который приведен для Al, исследовались его энергетические характеристики. Расчетный блок кристалла содержал 45000 атомов. Эксперимент состоял из серии расчетов – более 400 точек на одну поверхность, в каждом из которых производился сдвиг идеального кристалла вдоль плоскости (111). Сдвиг задавался посередине кристалла и составлял величину вектора сдвига (x, y). После этого кристалл представлял собой два кристаллита – А и В (см. рис. 1)

После сдвига вдоль плоскости [111] производился расчет удельной энергии кристалла в модели жестких сфер. Используя данную методику, была построена энергетическая  $\gamma$ -

поверхность для кристалла Al и ее проекция на плоскость сдвига (рис. 2).

По виду энергетической  $\gamma$ -поверхности можно судить о наиболее стабильных положениях атомов в нанокристаллах. Стабильные состояния соответствуют упаковке атомов вида ABCABC (более темные области на рис.2). Максимумы энергии (светлые области на рис. 2) соответствуют упаковке атомов вида ABCСAB, когда атом располагается над атомом – нестабильным состоянием. Стабильные и нестабильные состояния симметрично располжены на энергетической поверхности. Помимо областей стабильного и нестабильного состояния, на энергетической поверхности видны ДУ (на рис. 1 координаты ДУ (1,5 Å; 0,75 Å)), энергия дефекта 320 мДж/м<sup>2</sup>, что согласуется с экспериментальными данными по изучению энергии кристаллов [4].

Построение энергетических поверхностей позволяет обнаружить стабильные и высокоэнергетические состояния нанокристаллов. Определить положения ДУ и их энергию.

#### *Список литературы*

1. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф. Энергия образования и атомная конфигурация АФГ в плоскости куба в упорядоченных сплавах со сверхструктурой L1<sub>2</sub> // Металлофизика, №3. с. 128 (1985).
2. Ракитин Р.Ю. Границы зерен в металлах (GB3D) / РОСПАТЕНТ. Свидетельство № 2009610714 от 30 января 2009.
3. Girifalco L.A., Weiser V.G. Application of the Morse potential function to cubic metals // Phys. Rev., v.114, № 3, p.687 (1959).
4. Носкова Н.И. Дефекты и деформация монокристаллов. // Екатеринбург: УрО РАН., 1995. с. 184.

### ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ВБЛИЗИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ГПУ МЕТАЛЛАХ

Ватулина Е.А. – студент, Щербинин М.А. – студент,  
Зюзина Ю.И. – студент, Черных Е.В. – к.ф.-м.н., доцент  
Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

Сейчас, когда человечество перешагнуло рубеж XXI в., стало совершенно очевидно, что везде, где это возможно, – в транспорте, промышленности, быту и т.д. конструкторы стараются применять новейшие материалы: пластмассы, керамику, стекло, композиты. При этом доля металлических материалов, безусловно, уменьшается. Однако, это, в целом положительная тенденция, вовсе не означает, что «век металлов и сплавов истекает». Наоборот, им находится все более достойное применение. С одной стороны, в виду дороговизны металлов и постепенного истощения месторождений металлические изделия не имеет смысла использовать там, где есть возможность применить пластмассу. С другой – ответственные детали и механизмы машин должны быть изготовлены только из металлических материалов.

Современная военная, транспортная, авиационная и космическая техника призвана работать в условиях огромных скоростей, перепадов высоких и низких температур, агрессивных сред, ударных нагрузок. Это, в свою очередь, предъявляет высокие требования к материалам для ее изготовления – сочетание высокой удельной прочности, жаропрочности, теплопроводности, а в некоторых случаях проявления специфических физико-механических свойств. Таким требованиям могут удовлетворять только металлы и сплавы.

В настоящее время известен широкий круг металлов, кристаллизующихся по типу гексагональной плотноупакованной решетки. Способность металлов к образованию сплавов со специфическими физико-механическими свойствами представляет решающее значение

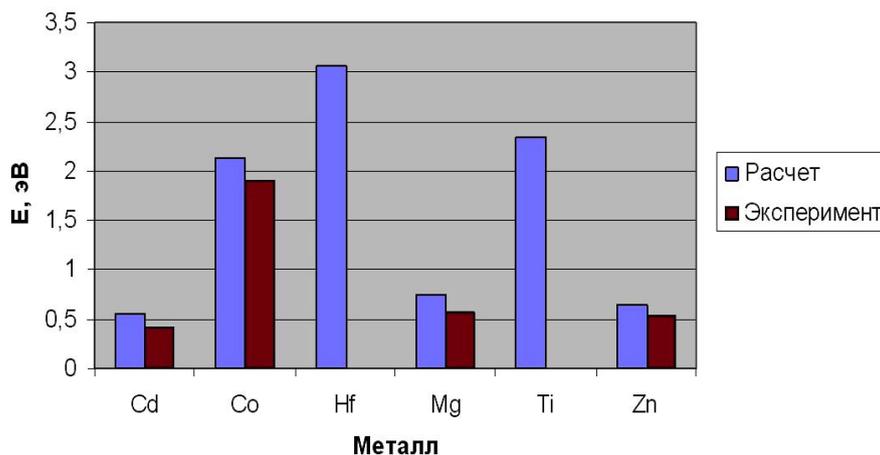
для технического применения. Существенное влияние на свойства металлов и сплавов оказывают дефекты кристаллической решетки: плоские, точечные и линейные. Вследствие сильной анизотропии структуры, дефекты в ГПУ металлах имеют ряд особенностей, что вызывает к ним несомненный интерес и требует подробного их рассмотрения.

Основной задачей данной работы является изучение состояния кристаллической решетки вблизи точечных дефектов в ГПУ металлах. О стабильности дефектов можно судить по энергиям их образования. Искажения же решетки препятствуют движению дислокаций, что способствует деформационному упрочнению кристалла. В этой связи немаловажный интерес представляет определение энергий образования и выявление стабильных конфигураций дефектов. Детальная информация о структуре и свойствах дефектов может быть получена методом компьютерного моделирования.

Для атомистического изучения дефектной структуры в ГПУ металлах специально разработана модель парных анизотропных межатомных потенциалов, определяющая взаимосвязь между внутренней энергией кристалла, межатомными силами и внешними факторами системы [1].

В рамках предложенной модели рассчитаны энергии образования вакансий для ГПУ металлов. Вакансии представляют собой единственный вид точечного дефекта, находящийся в тепловом равновесии с кристаллической решеткой [2]. Энергия образования вакансий находилась как разность между энергией блока кристалла с вакансией и того же по размерам и количеству атомов блока идеального кристалла. Блок кристалла с вакансией представлялся в виде формы близкой к сферической. В нем выделялись внутренняя часть и внешняя часть (скорлупа). Атомы внутренней части считались подвижными и поэтому в процессе релаксации испытывали перемещение в положения равновесия. Атомы скорлупы закреплялись. Радиус внутренней части блока полагался равным трем межатомным расстояниям, а толщина стенок скорлупы, также полагалась трем межатомным расстояниям. Поиск равновесной конфигурации кристаллической решетки вблизи вакансии проводился путем смещений атомов внутренней части блока в направлении действующих на них сил.

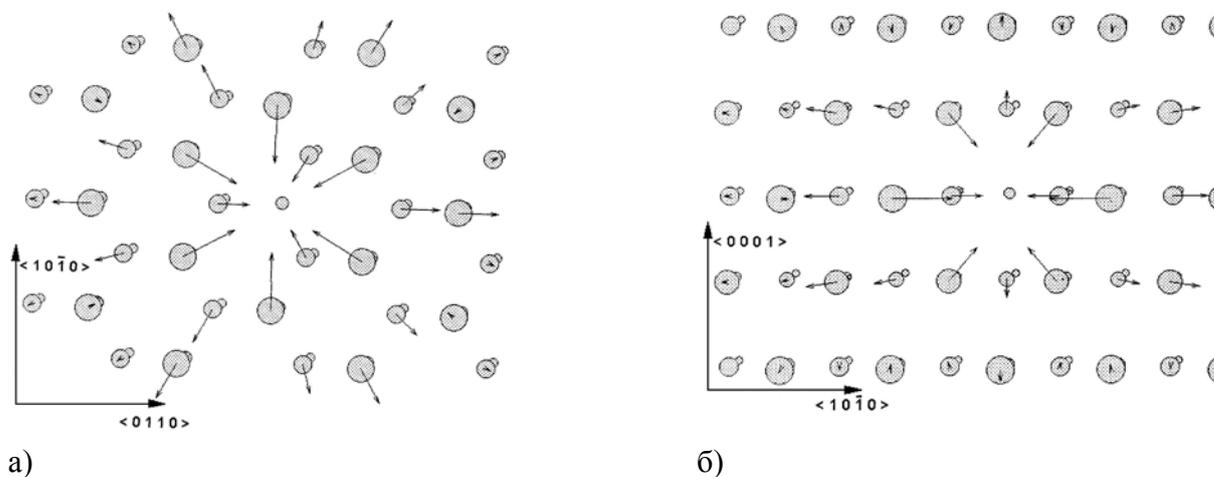
На рис.1 приведены теоретические и экспериментальные значения энергии образования вакансий для различных ГПУ металлов. Как видно, рассчитанные значения находятся в хорошем согласии с известными экспериментальными данными. Это доказывает, что в рамках предложенной анизотропной модели можно адекватно описать состояние кристаллов с ГПУ решеткой узлов.



**Рис.1.** Значения энергий образования вакансий, рассчитанные в рамках анизотропной модели для ГПУ металлов

Равновесные атомные конфигурации и соответствующие им картины микродеформаций вблизи вакансий на примере титана приведены на рис.2. Векторы смещений атомов из стартовых положений, которые имели место в идеальном кристалле, показаны в виде стрелок в увеличенном масштабе. Характерно, что все смещения

обусловлены движением атомов, принадлежащим первым трем от дефекта плоскостям. Анизотропная модель предсказывает наличие как нормальной, так и сдвиговой компонент векторов атомных смещений вблизи вакансии. Атомные смещения четвертых плоскостей оказываются почти нулевыми. Быстро убывающие величины атомных смещений при удалении от вакансии свидетельствуют о локализации дефекта.



**Рис.2.** Равновесные рассчитанные в анизотропной модели атомные конфигурации вблизи вакансии в титане. Плоскость рисунка: а)  $(0001)$ ; б)  $(10\bar{1}0)$ . Масштаб атомных смещений **30:1**

Таким образом, анализ показывает, что приемлемые значения энергий образования точечных дефектов и стабильные атомные конфигурации свидетельствуют о возможности применения анизотропного парного межатомного потенциала, обеспечивающего стабильность кристаллической решетки, к описанию точечных дефектов в ГПУ металлах.

### Список используемой литературы

1. Баранов М.А., Старостенков М.Д., Романенко В.В., Дубов Е.А., Черных Е.В., Крымских А.И. Состояние кристаллической решетки вблизи дефектов упаковки в ГПУ металлах и сплавах // Известия ВУЗов. Физика. 2000. т.43. №11 (приложение). С. 38-43.
2. Жирифалько Л.А. Статистическая физика твердого тела. М.: Мир, 1975. 382 с.

### ОПИСАНИЕ ОРБИТАЛЬНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ В ЛИТИИ.

Попов А.В. – к.ф.-м.н., старший преподаватель  
 Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

Целенаправленное создание наноструктурных материалов в режиме «самосборки» требует очень глубокого и достаточно полного представления о взаимодействии атомов и кластеров – строительных элементов создаваемых объектов. По своим физическо-химическим свойствам кластеры занимают промежуточное положение между атомами и молекулами с одной стороны и конденсированным веществом – с другой. Эволюция кластеров ведет к образованию либо газовой фазы, либо конденсированной фазы, проходя ряд метастабильных состояний. Они обладают высокой химической активностью, а цепь процессов перехода от одного состояния к другому является сложной и неравновесной. Еще более сложные взаимодействия кластеров происходят в условиях внешних воздействий, с помощью которых можно и управлять этими процессами [1, 2].

Наиболее полное и глубокое понимание процессов, проходящих при переходе кластера из одного промежуточного состояния в другое в условиях внешнего воздействия, может быть достигнуто, на наш взгляд, лишь на основе такой первопринципной теории,

которая позволила бы в рамках единой схемы рассчитать большую совокупность различных свойств материала, достаточно надежно подтвержденных экспериментом. Расчеты здесь важны и потому, что многие величины гораздо легче вычислить, чем измерить. С их помощью на основе хорошей теории уже сегодня можно получить весьма полное представление о свойствах вещества, даже еще не синтезированного. Достаточно точный количественный расчет важен еще и потому, что явления и процессы, происходящие при формировании и эволюции кластеров, определяются большим количеством конкурирующих факторов, не позволяющих ограничиться качественными соображениями. При этом возникает вопрос о выборе метода расчета, его физической корректности и математической точности.

Многие физико-химические свойства вещества определяются электронным строением. Знание электронного строения позволяет не только объяснять обнаруженное поведение вещества, но и предсказывать, создавать наноматериалы с заранее заданными свойствами. На сегодняшний день в исследовании электронной структуры атомов, молекул, твердых тел достигнут значительный успех. Наиболее популярными являются методы расчета электронной структуры вещества в основном состоянии. Однако больший интерес представляют возбуждения: тепловые, вакансионные, примесные, электромагнитные и др., в которых пребывают электроны реального вещества. Более того, измерить какие-либо характеристики электронов, находящихся в основном состоянии, означает: оказать на них воздействие, перевести их в возбужденное состояние.

Возбуждения можно описать, опираясь на многочастичную теорию возмущений, если возмущения малы. Однако трудоемкое применение этой теории для описания свойств конкретных материалов является основным сдерживающим фактором ее широкого использования. Еще большие трудности возникают, если возмущения велики.

Целью настоящей работы является создание количественной теории для описания возбужденных состояний электронов многоатомных систем с использованием методов компьютерного моделирования. А также осуществление поиска долгоживущих возбужденных состояний в литии, кластеры которого в основном состоянии достаточно хорошо изучены.

Ранее нами был предложен оригинальный метод описания возбужденных электронных состояний в атомах, учитывающий ширину энергетических уровней [3]. В основе данного метода лежит следующая идея.

Как известно, стандартное решение спектральной задачи основного состояния многоэлектронного атома может быть сведено к проблеме собственных значений, допускающей решения только при целых значениях орбитального квантового числа  $l=0,1,2,\dots$  и магнитного квантового числа  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .

Возбужденные же состояния способны спонтанно распадаться за конечное время  $\tau$ , и, согласно соотношению неопределенностей, обладают конечной шириной  $\Gamma \sim \hbar/\tau$  энергетического уровня. Волновая функция, описывающая эту систему, должна содержать такой экспоненциальный множитель, чтобы все вероятности, определяющиеся квадратом модуля волновой функции, затухали по закону  $\exp(-\Gamma t/\hbar)$ :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left\{-i\left(E - \frac{i\Gamma}{2}\right)\frac{t}{\hbar}\right\} \quad (1)$$

Будем считать, что для описания возбуждений аппроксимация центрального поля оправдана в той же степени, в какой она оправдана для описания незаполненных оболочек основного состояния. Тогда функцию  $\psi(\mathbf{r})$ , стоящую в правой части равенства (1), удобно искать в виде  $\psi = R(r)Y(\theta, \varphi)$ . Более того, пусть угловая функция  $Y(\theta, \varphi)$  удовлетворяет тем же уравнениям основного состояния, но регулярна только по  $\varphi$ . Произвольное поведение этой функции на сфере по переменной  $\theta$  снимает ограничение на целочисленные значения параметра  $l$  и, тем самым, позволяет включить в рассмотрение орбитальные переходы электронов. Будем считать  $l$ , в общем случае, комплексным:  $L=l+x+iy$ , где  $l$ , как и прежде,

пусть пробегает целочисленные значения, тогда область изменения комплексной добавки  $x+iy$  может быть ограничена  $|x|<0.5$  и  $|y|<0.5$ . Таким образом, задача отыскания спектра орбитальных возбуждений атома может быть сведена к проблеме собственных значений стационарного уравнения Шредингера:

$$\left( \mathbf{F} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{u + iv}{r^2} \right) \psi = \varepsilon \psi \quad (2)$$

Здесь  $\mathbf{F}$  – оператор Фока для атома в основном состоянии,  $u=x(x+2l+1)-y^2$ ,  $v=y(2x+2l+1)$ . Заметим, что при  $y \neq 0$  задача (2) является существенно неэрмитовой с комплексными значениями энергий  $\varepsilon = E - i\Gamma/2$ . Перебирая все возможные значения  $|x|<0.5$  и  $|y|<0.5$  в процессе поиска самосогласованных решений уравнений (2) можно проследить по минимуму полной энергии возбужденного атома за его спектральными характеристиками, обусловленными орбитальными переходами электронов.

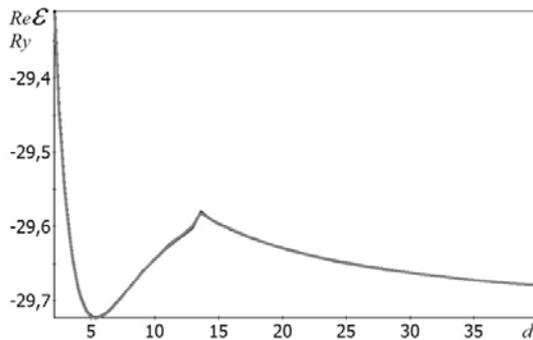
Нами проведено обобщение этой идеи для описания возбужденных состояний в многоатомных наносистемах, таких как кластеры [4].

Результаты самосогласованных расчетов, представленные на рис.1, показывают, что зависимости  $Re \mathcal{E}$  – действительных частей полных энергий системы двух атомов лития от  $d$  – расстояния между ними практически совпадают при всех выше указанных значениях  $y$ . Совместное существование двух атомов лития при больших расстояниях между ними вплоть до 13 боровских радиусов оказывается энергетически не выгодным. Но на пике зависимости  $Re \mathcal{E}$  от  $d$  при расстоянии между атомами, равном 13 боровским радиусам, происходит перестройка электронной структуры, а именно снятие вырождения состояний  $1s$ -симметрии. Мнимая часть полной энергии (заметим, что модуль этой величины есть вероятность распада возбуждения в единицу времени) при этом обращается в нуль (см. рис.2). Таким образом, указанное состояние при расстоянии между атомами, равном 13 боровским радиусам, является долгоживущим, пока система  $Li_2$  находится в поле внешнего воздействия.

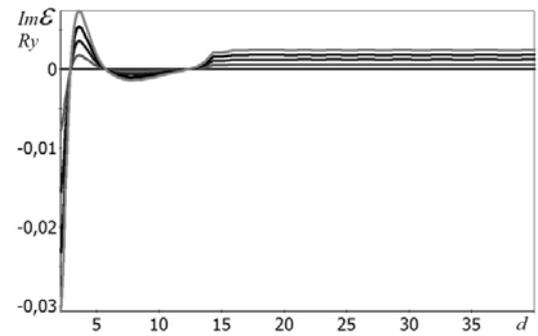
Другое долгоживущее состояние, когда  $Im \mathcal{E}=0$ , приходится на расстояние между атомами, равное 5,8 боровских радиусов (см. рис.2), соответствующее при этом минимуму  $Re \mathcal{E}$  – действительной части полной энергии системы двух атомов (см. рис.1). Указанное состояние является стабильным, а расстояние между атомами соответствует экспериментально наблюдаемому.

Мнимая часть полной энергии  $Im \mathcal{E}$  обращается в нуль и при расстоянии между атомами около трех боровских радиусов (см. рис.2). Действительная часть полной энергии  $Re \mathcal{E}$  при этом достигает достаточно больших значений (см. рис.1). В принципе и это долгоживущее возбуждение реализуемо.

Полученные нами данные позволяют предполагать, что если интересующий нас атом поместить в поле двух, трех, или большего числа атомов, то может образоваться кластер, стабильный по энергии и с продолжительным временем жизни при примерно таких же расстояниях между атомами. Для проверки этого предположения мы вычислили полную энергию трех атомов лития как функцию расстояния между ними при  $x=0$  и еще меньших значениях параметра  $y=0, 2 \cdot 10^{-6}, 4 \cdot 10^{-6}, 6 \cdot 10^{-6}, 8 \cdot 10^{-6}$ . Результаты расчетов показывают, что действительная часть полной энергии качественно ведет себя так же, как и для двух атомов. Мнимая часть полной энергии электронов обращается в нуль при таких же значениях расстояний между атомами, что и в системе  $Li_2$ .



**Рис.1.** Зависимость действительных частей полных энергий двух атомов лития в зависимости от  $d$  - расстояния между ними в боровских радиусах. Здесь, все линии при  $x=0$  и  $y=0$ ,  $2 \cdot 10^{-5}$ ,  $4 \cdot 10^{-5}$ ,  $6 \cdot 10^{-5}$ ,  $8 \cdot 10^{-5}$  практически совпадают.



**Рис.2.** Зависимость мнимых частей полных энергий двух атомов лития в зависимости от  $d$  - расстояния между ними при  $x=0$  и  $y=0$ ,  $2 \cdot 10^{-5}$ ,  $4 \cdot 10^{-5}$ ,  $6 \cdot 10^{-5}$ ,  $8 \cdot 10^{-5}$ . Здесь, линия с большим отклонением от прямой  $Im E=0$  соответствует большему значению параметра  $y$ .

Для проверки обнаруженных закономерностей мы вычислили полную энергию четырех атомов лития как функцию расстояния между ними при тех же значениях параметров  $x=0$  и  $y=0$ ,  $2 \cdot 10^{-7}$ ,  $4 \cdot 10^{-7}$ ,  $6 \cdot 10^{-7}$ ,  $8 \cdot 10^{-7}$ . Результаты расчетов подтверждают наши предположения. Ввиду того, что качественных изменений в структуре не обнаружено, мы не приводим графических представлений для трехатомных и четырехатомных систем. Обнаруженные долгоживущие состояния в литии могут быть объяснены наличием сильных корреляций ферми-систем в полях внешних возбуждений [5].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 08-02-90703).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Слабко В.В., Хачатрян Г.Г., Александровский А.С. Управляемая внешним световым полем самоорганизованная агрегация малых металлических частиц // Письма в ЖЭТФ. – 2006. – Т. 84. – № 6. – С. 360–364.
2. Балыкин В.И. Атомно-проекционная параллельная фабрикация наноструктур // УФН. – 2007. – Т. 177. – № 7. – С. 780–786.
3. Попов А.В. Решение спектральной задачи для электронов в атоме, учитывающей ширину энергетических уровней // Оптика и спектроскопия. – 2002. – Т. 93. – № 1. – С. 5–7.
4. Попов А.В. Конденсат возбужденных состояний в бериллии // Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50. – № 8. – С. 1530–1534.
5. Шагинян В.Р., Амусья М.Я., Попов К.Г. Универсальное поведение сильнокоррелированных ферми-систем // УФН. – 2007. – Т. 177. – № 6. – С. 585–618.

## ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНОГО НИКЕЛЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

В.Ю.Краснов, аспирант кафедры Общей физики,  
Г.М.Полетаев, к.ф.-м.н., доцент кафедры Общей физики

В последнее время уделяется большое внимание металлическим стеклам, то есть металлам и сплавам, находящимся в твердом аморфном состоянии. Они обладают рядом исключительных свойств: очень прочны и в то же время пластичны, имеют свойства магнитомягких материалов, коррозионно стойки [1, 2], что обуславливает широкие перспективы их применения в промышленности. При этом температурный интервал стабильности аморфной фазы, как правило, небольшой, – в результате отжига при сравнительно невысоких температурах металлические стекла кристаллизуются [3]. О механизме кристаллизации твердого аморфного металла в настоящее время известно чрезвычайно мало.

Основной целью настоящей работы являлось исследование структурных изменений, происходящих в аморфных плёнках Ni при кратковременном отжиге при температуре ниже и выше температуры аморфизации ( $T_g$ ), с помощью метода молекулярной динамики. Для описания взаимодействий атомов использовались парные потенциалы Морза. Параметры потенциалов были взяты из работы [4]. Радиус действия потенциалов ограничивался расстоянием 8 Å. Шаг интегрирования по времени в уравнениях движения равнялся  $10^{-14}$  с.

В качестве объектов моделирования были выбраны расчетные блоки размерами  $30 \times 30 \times 30$  (13500 атомов). Граничные условия по двум осям задавались периодическими, а по третьей – свободными. Таким образом, данные расчетные блоки можно рассматривать как участки тонкой металлической плёнки. Исходная структура расчетных блоков была получена путем сверхбыстрого охлаждения из расплава [5]. Ранее было выяснено [5], что структура металла зависит от скорости охлаждения. При скорости охлаждения более  $10^{14}$  К/с образуется аморфная фаза, упорядоченные кластеры в которой (ГЦК, ГПУ, сопряженные фигуры Франка-Каспера) имеют очень маленькие размеры и являются нестабильными образованиями. При уменьшении скорости охлаждения при затвердевании Ni размер возникающих упорядоченных кластеров увеличивается. При скоростях порядка  $10^{13}$  К/с образуется поликристаллическая структура, содержащая нанозерна как ГЦК и ГПУ кристаллов, так и состоящих из сопряженных фигур Франка-Каспера.

Полученные при разных скоростях охлаждения структуры расчетных блоков Ni были поделены на три типа: I) Хаотическая смесь обособленных элементарных ячеек кристаллов ГЦК, ГПУ и фигур Франка-Каспера (Ф-К); II) Структура, аналогичная образцам I типа, но с наличием в объеме сравнительно большого ГЦК кристаллического кластера (более 250 сопряженных элементарных ячеек); III) Структура, схожая с нанокристаллической – смесь сравнительно крупных кластеров ГЦК, ГПУ и Ф-К.

В различных источниках указывается разная температура стеклования никеля. В зависимости от методов её определения, она колеблется от 425 К [6] до 570 К [7]. Исходя из этого, в настоящей работе температура отжига была ограничена величиной 650 К.

Моделируемый процесс отжига состоял из трёх этапов: 1) линейный нагрев блоков со скоростью  $10^{12}$  К/с для фиксации  $T_g$  (при переходе структуры из аморфной в упорядоченную линейная зависимость «температура-время» должна иметь «скачок» в момент начала кристаллизации); 2) выдержка без нагрева продолжительностью 850 пс (85000 итераций) из расчета, чтобы весь процесс отжига продолжался не более 1,5 нс; 3) нелинейное охлаждение расчётных блоков до 0 К со скоростью  $10^{13}$  К/с для исключения погрешностей при анализе, вносимых тепловыми смещениями атомов.

Нагрев и охлаждение образцов моделировались с помощью изменения скорости всех атомов на каждом шаге интегрирования. Для определения изменений структуры расчётных блоков в процессе отжига были использованы визуализаторы углового распределения атомов

первой координационной сферы, фазового состава, размеров и количества кластеров ГЦК, ГПУ и Ф-К, а также графики зависимости температуры от времени эксперимента.

График зависимости температуры от времени эксперимента, как выяснилось, имеет характерный излом при линейном нагреве в районе 410-450 К для образцов I и II типов, что говорит о начале процесса кристаллизации, и хорошо совпадает с данными [10]. Кроме того, после прекращения нагрева расчётные блоки саморазогреваются до температуры 750-800 К. Для образцов I типа саморазогрев прекращается уже через 350-500 пс выдержки без нагрева, а температура образца II типа продолжает расти с уменьшающейся скоростью вплоть до начала охлаждения. По всей видимости, продолжительности выдержки 850 пс недостаточно для завершения всех процессов реструктуризации, происходящих в расчётном блоке. Для образца III типа саморазогрев не наблюдается, не наблюдается и излом на зависимости температуры от времени.

Диаграммы углового распределения атомов первой координационной сферы (рис.1 в) подтверждают отсутствие изменений в структуре образцов III в процессе отжига. Угловое распределение для образцов I (рис.1 а) после отжига очень хорошо совпадает с распределением для образцов III, что позволяет предположить о схожести их структуры.

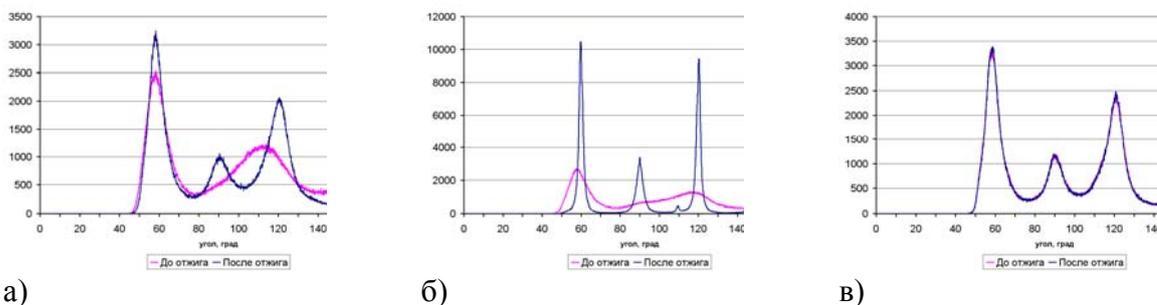


Рис.1. Изменение углового распределения первой координационной сферы: а) образец I; б) образец II; в) образец III.

Угловое распределение образцов II (рис.1 б) после отжига практически в точности соответствует угловому распределению ГЦК кристалла. Это подтверждается анализом изменения фазового состава образца. После достижения температуры  $T_g$  содержание элементарных ячеек ГЦК в объёме блока начинает стремительно расти, а содержание элементарных ячеек ГПУ и фигур Франка-Каспера снижается. В конечной структуре расчетного блока фигуры Франка-Каспера практически отсутствуют. Концентрация элементарных ячеек в образцах I и II в результате отжига практически не изменяется.

При оценке изменения размеров кластеров и концентрации элементарных ячеек в процессе отжига в образцах II, изначально содержащих зародыши ГЦК структуры, выявляется следующая динамика преобразований, происходящая в процессе отжига:

1. На этапе нагрева от 300 до 400 К происходит плавный рост кластеров ГЦК за счёт агрегатизации более мелких кластеров.

2. После преодоления отметки в 450-460 К начинается агрегатизация кластеров Ф-К и ГПУ, при этом продолжается наращивание размеров кластеров ГЦК.

3. После прекращения нагрева процесс агрегатизации продолжается в течение 100-150 пс.

4. При достижении некоторого критического размера, кластеры ГЦК начинают лавинообразно расти, «поглощая» более мелкие кластеры, состоящие из ячеек других типов.

Для образцов I наблюдался рост кластеров упорядоченной структуры при превышении температуры 420-480 К, происходящий в несколько «скачков». В большинстве случаев укрупнение происходило интенсивнее всего среди ГЦК кластеров, в некоторых – рост кластеров ГЦК и Ф-К происходил практически синхронно. Следует отметить весьма умеренный рост кластеров ГПУ, в некоторых случаях наблюдалось даже отсутствие такового.

Кластеры в образцах III оставались практически неизменными, некоторые колебания размеров связаны были, скорее всего, с высокой чувствительностью алгоритма нахождения элементарных ячеек в объёме.

В результате проведенной серии экспериментов было установлено, что аморфная структура Ni I типа является крайне нестабильной при температуре выше  $T_g$  (420-480 К в модели), и трансформируется в структуру типа нанокристаллической (образец III) менее чем за 1 нс. При нахождении в объеме расчетных блоков зародышей ГЦК структуры (образец II) при температуре выше  $T_g$  происходит сверхбыстрая кристаллизация почти всего блока. Несмотря на то, что нанокристаллическая структура является, как правило, нестабильной при температурах вблизи  $T_g$  [8], образцы III не претерпевали никаких изменений в процессе молекулярно-динамического отжига. По всей видимости, времени эксперимента в данном случае было недостаточно для осуществления подобных изменений в структуре металла.

### Литература

1. Полухин В.А., Ватолин Н.А. Моделирование аморфных металлов. - М.: Наука, 1985. - 288 с.
2. Лихачев В.А., Шудегов В.Е. Принципы организации аморфных структур. - С.Пб.: Изд-во С.Пб.У., 1999 - 227 с.
3. Кудинов Г.М. Кинетика кристаллизации аморфных металлов // ФММ. - 1985. - Т.60, №6. - С. 1081-1085.
4. Полетаев Г.М. Атомные механизмы диффузии в металлических системах с ГЦК решеткой. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. - Барнаул, 2006. - 412 с.
5. Краснов В.Ю., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Исследование структуры аморфного никеля // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2006. - №4. - С. 37-45.
6. Аморфные металлы. Судзуки К., Фудзимори Х., Хасимото К./Под. ред. Масумото Ц. Пер. с япон. – М.:Металлургия, 1987. - 328с.
7. Baikov A.P., Ivanchenko V.A., Motorin V.I. et al. The one-component metallic glasses from nickel and molybdenum //Phys. Lett. A. 1985. Vol. 113, N 1. P 38-40.
8. Квеглис Л.И. Структурообразование в аморфных и нанокристаллических пленках сплавов на основе переходных металлов. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. - Красноярск, 2005. - 280 с.

### ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОВОЛОКНЕ $Ni_3Al$ ПРИ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ В НАПРАВЛЕНИИ $\langle 111 \rangle$

Яшин А.В. – аспирант, Сеница Н.В. – аспирант

Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

В последние годы наблюдается большой интерес к исследованию свойств материалов, которые определяются на микроскопическом (молекулярном и атомном) уровне. Наряду с теорией и реальным экспериментом в задачах физики конденсированного состояния активно применяется компьютерное моделирование [1-6]. В литературе встречается много работ по моделированию деформации нанообъектов, в частности работы Н. Van Swygenhoven [1] и D. Wolf [2] по моделированию деформации в нанокристаллах. В области исследования нановолокон можно выделить работы посвященные исследованию распространения дислокаций в ГЦК – золоте [3], атомной перестройки при одноосной динамической деформации хрома и ниобия [4], механических свойств ультратонких нановолокон платины в зависимости от размера нановолокна и скорости деформации [5]. Ранее авторами статьи

опубликовано исследование механизмов восстановления структуры нанокристалла  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , подвергнутого динамической деформации растяжения в направлении  $\langle 001 \rangle$  [6].

В настоящей работе методом молекулярной динамики были исследованы структурно-энергетические изменения, происходившие в нановолокне  $\text{Ni}_3\text{Al}$  в процессе высокоскоростной динамической деформации растяжения в направлении  $\langle 111 \rangle$ . Расчеты были проведены при температуре 10 К, 300 К и 1300 К. Установлена связь между процессами структурной перестройки, происходящими в исследуемых материалах, и поведением графика запасенной энергии деформации. Определен многостадийный характер деформации, предложена классификация основных стадий разрушения нановолокна. Проанализированы и описаны механизмы атомной перестройки, сопровождающие каждую стадию деформации.

### Описание компьютерного эксперимента

Нановолокно имело вид шестигранника с шестиугольным основанием в плоскости (111) и высотой (главной осью нановолокна), соответствующей направлению  $\langle 111 \rangle$ . Размер расчетного блока составлял 10608 атомов. К границам расчетного блока были приложены смешанные граничные условия: жесткие в направлении  $\langle 111 \rangle$  и свободные по боковым граням.

Для расчета атомной перестройки был применен метод молекулярной динамики с использованием парных потенциальных функций Морзе. Параметры парных потенциалов были заимствованы из работы [7]. Радиус обрезания для парного взаимодействия между атомами взят равным 0,494 нм.

Динамическая одноосная деформация растяжения моделировалась посредством поступательного смещения всех атомов жестких границ, вдоль оси  $\langle 111 \rangle$  на 0,002 нм через каждые 0,1 пс, что соответствовало скорости деформации  $3,2 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$ . Такой порядок скорости связан с ограничениями метода молекулярной динамики и встречается в исследованиях по моделированию динамической деформации [1, 2, 5, 8]. При деформации нановолокна температура корректировалась через каждые 0,1 пс. Результаты, представленные в статье, получены с помощью зарегистрированной программы (свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ №2007611472 от 09 апреля 2007 г.), на персональной ЭВМ.

### Результаты и обсуждение

В результате расчетов построены графики зависимости запасенной энергии деформации от времени эксперимента для случаев деформации нановолокна  $\text{Ni}_3\text{Al}$  в направлении  $\langle 111 \rangle$  при 10 К, 300 К и 1300 К (рис. 1).

На рис. 1 цифрой I отмечена стадия квазиупругой деформации, II – пластической деформации, III – течения (образования шейки) и IV – разрушения. Графики отражают структурно-энергетические процессы, происходившие в материале в процессе динамической деформации.

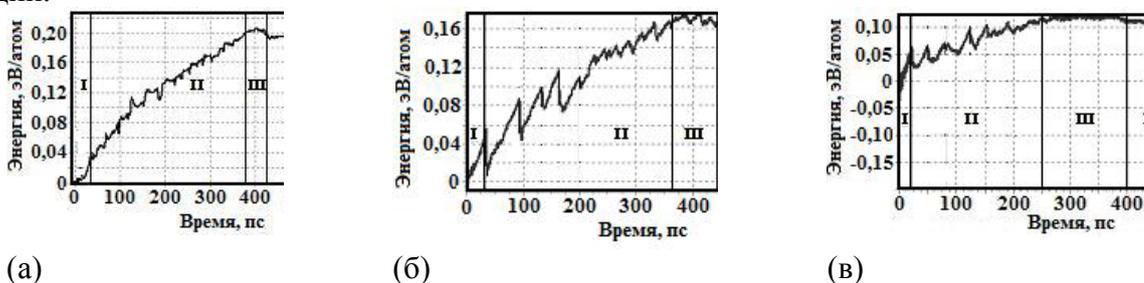


Рис. 1. Зависимость запасенной энергии деформации от времени эксперимента при температуре 10 К (а), 300 К (б) и 1300 К (в)

Деформация на I стадии, при низких температурах (10 К и 300 К), сопровождалась незначительным смещением атомов деформируемого нановолокна относительно начальных положений и ростом напряжения на захватах. Характер атомной перестройки нановолокна зависел от температуры, при которой проводился эксперимент. При 10 К и 300 К наблюдалось лишь незначительное движение атомов по направлению к захватам, в то время

как, при 1300 К атомы могли выходить из слоя (111) и перемещаться внутри нановолокна от захватов к центральной части нановолокна и от центральной части к захватам. При низких температурах атомы имели небольшую амплитуду колебаний, что делало не выгодным движение отдельных атомов. На первой стадии деформации происходило образование точечных дефектов: вакансий, межузельных атомов, атомов замещения и пар Френкеля.

Окончание первой стадии деформации при 10 К и 300 К сопровождалось сдвигом групп атомов. Смещения достигали одного межатомного расстояния за 1 пс. Коллективное движение атомов при 300 К приводило к резкому падению запасенной энергии деформации (рис. 1.). После окончания коллективного движения происходила релаксация и восстановление структуры с генерацией новых атомных плоскостей типа {111}. При 1300 К отдельные атомы, смещаясь, перераспределялись по нановолокну, что приводило к изменению структуры, наибольшие смещения атомов наблюдались вблизи свободной поверхности.

На II стадии, при низких температурах, деформация происходила по следующей схеме: накопление точечных дефектов, сопровождаемое ростом напряжения на захватах; при достижении определенного уровня деформации под действием возрастающего напряжения происходило проскальзывание частей кристалла друг относительно друга за короткий промежуток времени (1-2 пс), что соответствовало точке бифуркации на графике запасенной энергии деформации; после проскальзывания происходило частичное восстановление структуры.

Очевидно, что степень изменения запасенной энергии деформации и напряжения на захватах прямо связана с количеством атомов задействованных в коллективных смещениях при проскальзывании частей кристалла в точке бифуркации.

На второй стадии деформации образовывались дефекты в виде межзеренных границ, двойников и антифазных границ (АФГ).

Постепенно вследствие сдвигов атомов, при восстановлении структуры после прохождения точек бифуркации, происходило уменьшение площади сечения нановолокна. Образовывалась шейка. Стадия пластической деформации в области шейки была выделена в отдельную III стадию – течение.

На III стадии деформации основная перестройка атомной структуры происходила в области шейки. На данной стадии перемещались отдельные атомы по направлению к месту разрыва. Изменения энергии при этом были незначительны. График запасенной энергии деформации устанавливался в горизонтальном коридоре, то есть происходили незначительные изменения атомной структуры нановолокна.

На IV стадии происходил процесс разрушения, который завершался разделением исходного нановолокна на две части. Это приводило к незначительному снижению значения запасенной энергии деформации.

### **Выводы**

В результате проведенных исследований выделены четыре стадии деформации нановолокна: упругая, пластическая, течения и стадия разрушения.

Установлено, что на первой стадии образуются точечные дефекты: вакансии, атомы замещения, межузельные атомы и пары Френкеля. На второй стадии образуются межзеренные границы, АФГ и двойники.

Показано, что резкое падение запасенной энергии деформации при 300 К вызвано коллективным перемещением атомов за короткий промежуток времени, составлявший до 2 пс.

### **Список литературы**

1. Swygenhoven H., Derlet P.M., Froseth A.G. Stacking fault energies and slip in nanocrystalline metals. *Nature Materials*, 2004, v. 3, p. 399 - 403.
2. Yamakov V., Wolf D., Phillpot S.R., Gleiter H. Deformation mechanism crossover and mechanical behavior in nanocrystalline materials. *Phill. Mag. Lett.*, 2003, v. 83, p. 385-393.

3. Diao J., Gall K., Dunn M. L., Zimmerman J. A. Atomistic simulations of the yielding of gold nanowires. *Acta Materialia*, 2006, v. 54, p. 643–653.
4. Огородников В.В. Компьютерные модели в материаловедении. Краевые задачи и математическое моделирование, 2008, т. 2, с. 82-90.
5. 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.
6. Starostenkov M.D., Yashin A.V., Sinitza N.V. Atomic Mechanisms of Structural Reconstruction of Nanocrystal FCC at an Impulsive Deformation. *Book of abstracts: 2008 E-MRS Fall Meeting Warsaw (Poland)*, 2008, p. 170.
7. Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа  $A_3B$  и  $A_3B(C)$ . Томск: Томский государственный университет, 1987, 214 с.
8. Зольников К.П., Уваров Т.Ю., Псахье С.Г. Об анизотропии процессов пластической деформации и разрушения при динамическом нагружении. *Письма ЖТФ*, 2001, т. 27, с. 1-7.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВИСКОЗИМЕТРИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЙ РАСТВОРОВ И РАСПЛАВОВ ЛИНЕЙНЫХ ПОЛИМЕРОВ

Афонин Г.Л. – студент, Дудкин В.И. – к.т.н., доцент  
Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

Течениями растворов и расплавов линейных полимеров занимается реология. [1] Реология – сложная ранжированная и объемная наука о течении полимерных жидкостей, которая в последние годы приобретает все большее значение. Это связано, прежде всего, с существованием тенденции к замене традиционно используемых материалов (черные и цветные металлы, дерево, естественные волокна и др.) синтетическими полимерами. Вследствие этого происходит увеличение производства последних. Таким образом, уже в наше время наблюдается повсеместное применение полимеров: пластмасс и полиэтиленов различной структуры.

Течения, реализуемые в опытах с растворами и расплавами линейных полимеров, разнообразны: стационарные и нестационарные; линейные и нелинейные; однородные и неоднородные. Естественно, что проверку любой реологической модели на адекватность следует начинать с наиболее простых течений.

Таковыми течениями являются вискозиметрические течения, их реализуют в вискозиметрах различных конструкций, и они характеризуются тем, что тензоры градиентов скорости являются известными функциями времени. Поэтому моделирование таких течений сводится к интегрированию обыкновенных дифференциальных уравнений для внутренних термодинамических параметров, что является достаточно простой задачей.

Реологическая модель задается уравнением, связывающим напряжения, имеющиеся в окрестности некоторой точки среды, и деформации, возникающие вследствие этого, причем в это уравнение могут входить и скорости напряжений и деформаций, т.е. их производные по времени, и интегралы по времени от напряжений или деформаций. Это уравнение называется реологическим определяющим соотношением. [2, 3]

Определяющее соотношение должно быть сформулировано как связь тензоров напряжений и деформаций на основе всех известных опытных данных, но сами опыты эту связь не устанавливают, а лишь показывают ее проявления в некоторых частных случаях.

Наиболее исследованными из вискозиметрических течений являются простой сдвиг и одноосное растяжение. В случае простого сдвигового течения только одна компонента тензора градиентов скорости  $v_{12}(t)$  отлична от нуля. В случае же одноосного растяжения все диагональные члены тензора градиентов скорости неравны нулю  $v_{11} = -v_{22} \cdot 2 = -v_{33} \cdot 2$ .

В качестве исследуемой модели выберем обобщенную модель Виноградова-Покровского:

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + 3\frac{\eta_0}{\tau_0}a_{ik},$$

$$\frac{d}{dt}a_{ik} - \nu_{ij}a_{jk} - \nu_{kj}a_{ji} + \frac{1 + (\kappa - \beta)I}{\tau_0}a_{ik} = \frac{2}{3}\gamma_{ik} - \frac{3\beta}{\tau_0}a_{ij}a_{jk}$$

здесь  $\eta_0 = \eta T^* \tau_0$  и  $\tau_0$  – начальные значения сдвиговой вязкости и времени релаксации,  $I = \sum a_{ij}$ .

Компьютерное моделирование заключается в проведении серии вычислительных экспериментов на компьютере, целью которых является анализ, интерпретация и сопоставление результатов моделирования с реальным поведением изучаемого объекта и, при необходимости, последующее уточнение модели и т. д.

Реологическая модель реализована на языке программирования высшего уровня Delphi. Адекватность любой реологической модели проверяется сравнением с экспериментальными данными. Оценка адекватности проводится качественно на основе наглядного сравнения экспериментальной и теоретической зависимостей и автоматически количественно. На основе метода наименьших квадратов оценивается отдаление расчетной зависимости от экспериментальной и подбором параметров модели происходит приближение теоретической зависимости к желаемому результату.

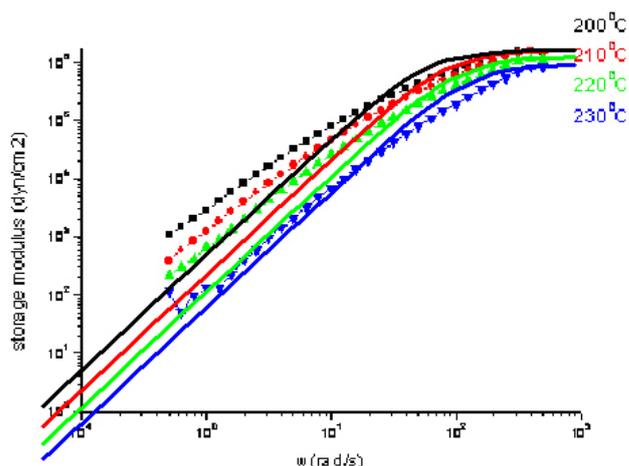


Рисунок 1 – Результаты сравнения расчетных и теоретических зависимостей

Список литературы:

1. Рейнер М. Реология. Пер. с англ. — М: «Наука», 1965. - 224 с;
2. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. — М: «Наука», 1997. — 320 с;
3. Пышноград Г.В. Математические основы реологии полимерных сред. — Рубцовск: «Рубцовский индустриальный институт», 1999. — 82с.