

Каніболоцький Д.С., Верховлюк А.М., Щерецький О.А., Афанасієв М.В.
(ФТИМС НАН України, м. Київ)

МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ РОЗПЛАВУ Al – 0,2% Ti

kanibolotsky@univ.kiev.ua

З використанням пакету програм LAMMPS виконано моделювання молекулярної динаміки рідкого сплаву Al – 0,2 мас. % Ti для температур від 677 °C до 1400 °C, що відтворює рух атомів у часовому інтервалі $2 \cdot 10^{-9}$ с. В якості вихідної структури взятий нескінченний ГЦК монокристал алюмінію, в якому відповідна частина атомів Al замінена на атоми Ti. Енергію міжатомної взаємодії розраховували з використанням потенціалу з роботи [1]. Інтегрування рівняння руху атомів здійснювали з кроком 10^{-15} с, координати атомів записували у вихідний файл траєкторії через кожні 10^{-12} с.

При 677 °C, 700 °C та 740 °C кристал залишається у перегрітому твердому стані протягом 10^{-9} с. Подальше моделювання перегрітого твердого сплаву припиняли із-за значного часу комп'ютерних розрахунків. Для одержання моделей розплавів при цих температурах спочатку задавали температуру системи 840 °C, а потім її лінійно знижували до заданої за час, необхідний для переходу сплаву у рідку фазу (від $1 \cdot 10^{-11}$ до $1,55 \cdot 10^{-11}$ с). При 790 °C сплав переходить у рідкий стан за $49 \cdot 10^{-12}$ с, при 840 °C і вище – від $9 \cdot 10^{-12}$ до $4 \cdot 10^{-12}$ с. Із збільшенням температури від 677 °C до 1400 °C густина розплаву зменшується від 2416 до 2298 кг/м³, повна енергія системи змінюється від -288,7 до -267,3 кДж/моль, потенційна енергія – від -300,5 до -288,2 кДж/моль, потенційна енергія атомів Ti – від -309,2 до -296,4 кДж/моль, висота першого піку радіальної функції розподілу навколо атомів Al – від 2,7793 до 2,1776 умовних одиниць (у. о.), навколо атомів Ti – від 3,7162 до 2,9132 у.о., середній об'єм багатогранників Вороного для атомів Al збільшується від 18,560 до 19,516 Å³, для атомів Ti – від 19,571 до 20,767 Å³, середня кількість граней багатогранників Вороного для Al зростає від 14,3964 до 14,6939, для атомів Ti – від 15,204 до 15,381, коефіцієнт самодифузії збільшується для Al від $5,008 \cdot 10^{-9}$ до $18,529 \cdot 10^{-9}$ м²/с, для Ti – від $2,599 \cdot 10^{-9}$ до $12,084 \cdot 10^{-9}$ м²/с. Одержані дані з густини, радіальної функції розподілу та коефіцієнта самодифузії добре узгоджуються з результатами експериментальних досліджень рідкого Al та сплавів Al – Ti [2...7], що підтверджує достовірність розрахунків. Потенційна енергія одного моля атомів Ti в рідкому сплаві Al – 0,2% Ti більша за абсолютною величиною, ніж потенційна енергія одного моля сплаву. Тобто взаємодія атомів Ti з атомами Al більш сильна, ніж середня міжатомна взаємодія в системі. Висота першого піку радіальної функції розподілу навколо атомів Ti вище, ніж навколо атомів Al. Кількість граней багатогранників Вороного (що відповідає координатному числу для відповідного об'єму) також вище для Ti, ніж для Al. Коефіцієнт самодифузії вище для атомів Al, ніж для атомів Ti, тобто атоми Al більш рухливі. Таким чином, одержані дані свідчать, що атоми Ti більш схильні, ніж атоми Al, координувати навколо себе атоми Al. Тобто в розплаві формуються кластери з центральним атомом Ti. При збільшенні температури зменшуються висота першого піку радіальної функції розподілу навколо атомів Ti та абсолютне значення енергії взаємодії між атомами Ti та Al, зростають об'єми багатогранників Вороного та коефіцієнт самодифузії Ti, і тому при нагріванні стійкість кластерів знижується.

Література:

1. Zope R.R., Mishin Y. // Physical Review B. – 2003. – V. 68. – 024102.
2. Fessler R.R., Kaplow R., Averbach B.L. // Physical Review. – 1966. – V. 150, № 1. – P. 34...43.
3. Assael M.J., Kakosimos K., Banish R.M. et al. // Journal of Physical and Chemical Reference Data. – 2006. – V. 35, № 1. – P. 285...300.
4. Ejima T., Yamamura T. // Journal de Physique. – 1980. – T. 41, Suppl. 8, Colloque C8. – P. 345...348.
5. Kargl F., Sondermann E., Weis H., Meyer A. // High Temp. High Press, 2013. – V. 42. – P. 3...21.
6. Meyer A. // EPJ Web of Conferences. – 2015. – V. 83. – 01002.
7. Demmel F., Szubrin D., Pilgrim W.-C., Morkel C. // Physical Review B, 2011. – V. 84. – 014307.