

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНОГО ЖЕЛЕЗА В УСЛОВИЯХ ИЗОХРОННОГО ОТЖИГА

А.В.Евтеев¹⁾, А.Т.Косилов, А.В.Миленин

Воронежский государственный технический университет
394026 Воронеж, Россия

Поступила в редакцию 8 февраля 2000 г.

Методом молекулярной динамики в приближении парного потенциала Пака – Доямы смоделирован изохорический нагрев аморфного железа со средней скоростью $\sim 6.6 \cdot 10^{11}$ К/с. В области температур $1100 \div 1180$ К зафиксирована ОЦК-кристаллизация модельной системы.

PACS: 61.43.Vn

В настоящей работе наблюдалась кристаллизация в системе частиц с межатомным потенциалом Пака – Доямы [1]. Эмпирический парный потенциал Пака – Доямы имеет вид полинома четвертой степени:

$$\phi(r) = -0.188917(r - 1.82709)^4 + 1.70192(r - 2.50849)^2 - 0.198294 \text{ эВ} \quad (1)$$

(r выражено в Å). Радиус обрезания потенциала равен $r_c = 3.44$ Å. Параметры этого потенциала определены из данных по упругим свойствам α -Fe. Использование его при моделировании жидкого и аморфного железа обеспечивает хорошее согласие расчетных и экспериментальных структурных характеристик [2–4].

Предварительно была построена молекулярно-динамическая (МД) модель жидкого железа при $T = 1823$ К с реальной плотностью 7030 кг/м^3 [5]. В качестве исходной структуры взяли ОЦК-решетку. Модель содержала 2000 атомов в основном кубе с периодическими граничными условиями. Атомам в начальный момент времени сообщались скорости согласно распределению Максвелла. Методика МД расчета состояла в численном интегрировании уравнений движения с временным шагом $\Delta t = 1.523 \cdot 10^{-15}$ с по алгоритму Верле в скоростной форме [6]. Плавление и релаксация системы проводились при указанной температуре в течение 2000 временных шагов. Затем температурное ограничение снималось и в системе на протяжении 4000 временных шагов при постоянной внутренней энергии (адиабатические условия) устанавливалось тепловое равновесие. Здесь следует отметить, что начальная конфигурация несмотря на размещение атомов в узлах ОЦК-решетки является крайне неустойчивой и практически мгновенно плавится, так как плотность и температура системы соответствуют жидкому железу.

Аморфное состояние получали “мгновенной” закалкой (методом статической релаксации (СР)) модели расплава, предварительно увеличив ее плотность до значения 7800 кг/м^3 (в связи с отсутствием экспериментальных данных плотность выбирали в соответствии с данными для α -Fe [7] с учетом поправки $\sim 1\%$ на аморфизацию). Далее система подвергалась изохронному отжигу, периодическая процедура которого сводилась к ступенчатому повышению температуры на 20 К, поддержанию этой температуры в системе на протяжении 1000 временных шагов и последующему отжигу

¹⁾ e-mail: mfm@nsl.vstu.ac.ru

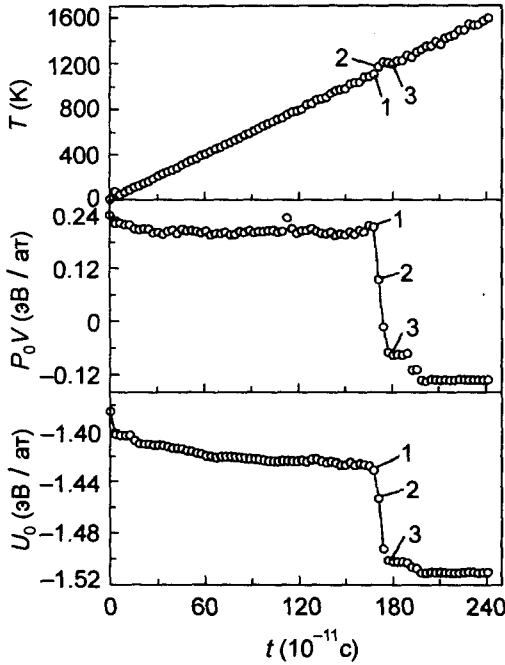


Рис.1. Зависимость температуры, а также произведения давления на объем и потенциальной энергии после статической релаксации модели железа в условиях изохронного отжига от времени. Цифры 1, 2, 3 соответствуют временам $1100000 \cdot \Delta t$, $1120000 \cdot \Delta t$, $1180000 \cdot \Delta t$ и номерам графиков на рис.2, 3

в адиабатических условиях в течение 19000 временных шагов. Таким образом, продолжительность одного периода составляла 20000 временных шагов или $3.046 \cdot 10^{-11}$ с, а средняя скорость нагрева приблизительно равнялась $6.6 \cdot 10^{11}$ К/с. После каждого такого периода систему методом СР переводили в состояние с $T = 0$ К, предоставляя возможность атомам занять равновесные положения в локальных потенциальных ямах.

В процессе моделирования рассчитывались следующие термодинамические характеристики:

- 1) кинетическая энергия

$$E_k = \sum_{i=1}^N \frac{mv_i^2}{2}; \quad (2)$$

- 2) потенциальная энергия

$$U = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \phi(r_{ij}); \quad (3)$$

- 3) полная энергия

$$E = E_k + U; \quad (4)$$

- 4) давление

$$P = \frac{1}{3V} \left(\sum_{i=1}^N mv_i^2 - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N r_{ij} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right), \quad (5)$$

где N – число атомов, m – масса атома, v_i – скорость атома i , r_{ij} – расстояние между атомами i и j , V – объем системы. Температуру системы вычисляли из

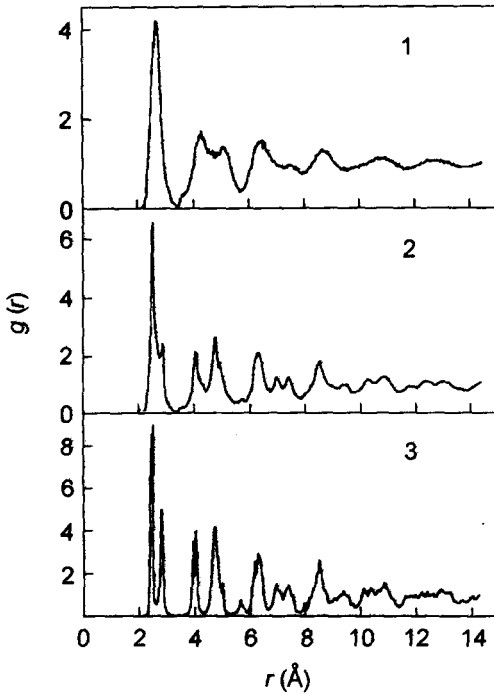


Рис.2. Парные функции радиального распределения атомов $g(r)$ статически релаксированных моделей, рассчитанные в моменты времени: 1 - $1100000 \cdot \Delta t$, 2 - $1120000 \cdot \Delta t$, 3 - $1180000 \cdot \Delta t$

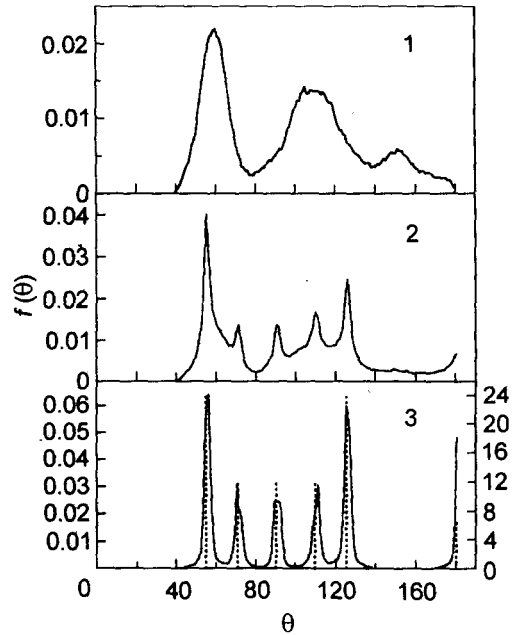


Рис.3. Угловые корреляционные функции $f(\theta)$ статически релаксированных моделей, рассчитанные в моменты времени: 1 - $1100000 \cdot \Delta t$, 2 - $1120000 \cdot \Delta t$, 3 - $1180000 \cdot \Delta t$. Пунктирными вертикальными линиями показано распределение углов в идеальной ОЦК-решетке - 3 (правая шкала)

усредненного (в течение последних 16000 временных шагов каждого периода) значения кинетической энергии

$$T = 2\bar{E}_k / 3Nk_B, \quad (6)$$

где k_B - постоянная Больцмана, а черта обозначает усреднение по времени.

Из рис.1, на котором представлены временные зависимости температуры модели, а также произведения давления на объем и потенциальной энергии после статической релаксации, видно, что между 1100000-м и 1160000-м временными шагами ($T \approx 1100 \div 1180$ К) произошел фазовый переход первого рода. Для выяснения структурных изменений при фазовом переходе рассчитывали парные функции радиального распределения атомов (ПФРРА), а также проводили статистико-геометрический анализ на основе многогранников Вороного (МВ), в том числе расчет угловых корреляционных функций (УКФ), описывающих распределение углов между парами ближайших соседей и центром многогранника. Положение пиков ПФРРА (рис.2) и УКФ (рис.3), свидетельствует о том, что образовалась кристаллическая фаза с ОЦК-решеткой. Это же подтверждает анализ распределения МВ по типу. Напомним, что отдельный МВ можно описать совокупностью чисел n_q , равных числу граней, имеющих q сторон ($n_3 - n_4 - n_5 - \dots$) [8]. После кристаллизации координация вокруг $\sim 90\%$ атомов модели характеризуется МВ (0-6-0-8) (кубоктаэдр - ячейка Вигнера - Зейтца

ОЦК-решетки). Дальнейшее повышение температуры приводит к дополнительному упорядочению кристаллической структуры, которое завершается при $T \approx 1300$ К. При этом доля атомов, имеющих МВ (0-6-0-8), достигает величины $\sim 97\%$.

1. H.M.Pak and M.Doyama, J. Fac. Eng., Univ. of Tokio **30B**, 111 (1969).
2. R.Yamamoto, H.Matsuoka, and M.Doyama, Phys. Stat. Sol. (a) **45**, 305 (1978).
3. Д.К.Белашенко, ФММ **60**, 1076 (1985).
4. А.В.Евтеев, А.Т.Косилов, Расплавы **1**, 55 (1998).
5. А.А.Вертман, А.М.Самарин, *Свойства расплавов железа*, М.: Наука, 1969.
6. L.Verlet, Phys. Rev. **159**, 98 (1967).
7. К.Дж.Смитлз, *Металлы*, М.: Металлургия, 1980.
8. J.L.Finney, J. Comp. Phys. **32**, 137 (1979).