

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОКРИСТАЛЛАХ И НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ.

Старостенков М.Д., Холодова Н.Б., Полетаев Г.М., Попова Г.В., Денисова Н.Ф., Демина И.А.

Введение.

В настоящее время при исследованиях в физике конденсированного состояния успешно применяются три основных подхода: теория, реальный эксперимент и компьютерный эксперимент. В прошлом развитие данного направления осуществлялось теоретическими и экспериментальными методами. При накоплении экспериментальных данных их обобщение приводило к определенным фундаментальным представлениям и к последующей постановке эксперимента с целью обобщения теории. В то же время существует множество проблем, решение которых оказывается трудным, дорогостоящим, а в ряде случаев, неразрешимым. Это прежде всего процессы, протекающие при высоких скоростях, при импульсных, высокоэнергетических воздействиях на материал, таких как, например, лазерное, радиационное воздействие, ионная имплантация. В таких случаях экспериментально удается исследовать начальное состояние материала и конечный результат. Процесс и стадии структурно-фазовой трансформации материала при подобных воздействиях оказываются невыясненными. К подобным процессам можно отнести и самораспространяющийся высокотемпературный синтез. С другой стороны, такие процессы как старение, фазовые переходы типа порядок-беспорядок в упорядоченных сплавах развиваются во многих случаях в течение длительного интервала времени. Так, например, упорядочение сплава NiFe по сверхструктуре $L1_0$ не удается достигнуть в реальном эксперименте. Эта сверхструктура была обнаружена только в метеоритах. Подобные проблемы существуют не только при исследовании объемных кристаллических материалов, но и в большей степени при изучении структурно-энергетических превращений, имеющих место в наноструктурных и низкоразмерных материалах. Компьютерный эксперимент позволяет сократить время реализации таких процессов.

Компьютерный эксперимент. Основные положения, требования и проблемы.

Прежде всего, компьютерный эксперимент должен базироваться на существующих в настоящее время фундаментальных физических представлениях. К таким положениям относятся: геометрическое построение исследуемой структуры, выбор оптимального блока кристалла, достаточного для получения результатов, независимых от его размеров. Так как компьютерный эксперимент имеет определенные технические ограничения, к границам расчетного блока в зависимости от задачи исследования должны быть приложены определенные граничные условия. Такими условиями являются: периодические, гибкие, жесткие и их комбинации. Следующим важным моментом является выбор методик, задания, характера межатомных и межмолекулярных взаимодействий. Такие взаимодействия могут быть построены с использованием первопринципных, ab-initio методов с применением эмпирических и полумпирических функций. В зависимости от типа материала и задачи исследования такими функциями могут быть парные потенциалы типа Борна - Майера, Ленарда - Джонса, Ми - Грюнайзена и различные степенные функции. Существуют комбинации первопринципного и потенциального подхода, такие как метод функционала электронной плотности. Не во всех случаях в настоящее время удается использовать точные первопринципные методы, так как они, прежде всего, базируются на идеальной, бездефектной структуре материала. А при структурно-энергетических превращениях материала происходит нарушение идеальности, и в каждом случае происходят изменения во взаимодействиях между атомами. Построенные на основе первопринципных методов, функции межатомного взаимодействия должны быть пересчитаны с учетом определенных структурных состояний материала, что в настоящее время является проблемой и сложной технической задачей. В ином случае точность первопринципного подхода теряется и может быть несравнимо меньшей по отношению к использованию

простых полуэмпирических потенциальных функций. Поэтому применение полуэмпирических потенциалов в настоящее время является вполне оправданным. Конечно, к использованию подобных парных потенциалов должны быть предъявлены определенные требования. Прежде всего, их параметры должны быть подобраны по наиболее точно экспериментально определяемым характеристикам. К ним относятся структурные, энергетические и силовые.

Структурной характеристикой, как правило, является параметр решетки исследуемого материала или межатомные расстояния. Данные параметры экспериментально определяются методами рентгеноструктурного анализа и методами электронной дифракции. Точность их экспериментального определения оказывается чрезвычайно высокой и составляет величины до $10^{-4}\%$.

Следующие важные экспериментальные параметры можно отнести к силовым. Это, прежде всего, упругие модули либо объемный модуль упругости. В условиях равновесия кристалла силы межатомных связей должны быть скомпенсированы. Точность определения данных параметров оказывается несколько ниже по сравнению со структурными характеристиками и выражается в процентах.

Экспериментальное определение энергетических характеристик материала оказывается более сложной задачей. Они прежде всего зависят от реального состояния материала, области определения энергетического параметра внутри структуры материала. Так, например, параметр, называемый энергией сублимации, соответствует испарению атома из кристалла и переводу его в газообразное состояние. Энергия образования вакансий зависит как от положения атома, переходящего на поверхность кристалла, так и от конкретной области поверхности. В зависимости от используемых методов, разброс по точности определения данных параметров может колебаться до 100 и более процентов.

Таким образом, при применении полуэмпирических потенциалов с использованием их подгонки по трем типам эмпирических параметров, удастся исследовать структурные и силовые изменения, происходящие в материале. К энергетическим параметрам следует относиться осторожно, принимать во внимание при компьютерном эксперименте только их относительное изменение и рассматривать направления их изменений при исследо-

вании структурно-фазовых превращений в материалах, особенно в случае нанокристаллов и низкоразмерных систем. При переходе от однокомпонентных материалов к многокомпонентным возрастает сложность определения взаимодействия между атомами при применении как первопринципных, так и эмпирических и полуэмпирических методов. Здесь также требуется опереться на определяемые в реальном эксперименте структурно-энергетические параметры, характеризующие многокомпонентный материал.

Следующий важный фактор компьютерного эксперимента заключается в оптимальном выборе предельных межатомных расстояний, при которых взаимодействиями между атомами можно пренебречь. От этого фактора зависит скорость проведения компьютерного эксперимента.

В настоящее время существует три основных метода компьютерного эксперимента. Метод вариационной квазистатики, когда ищется минимум внутренней потенциальной энергии кристалла или структуры по всевозможным атомным смещениям. В этом случае расчеты выполняются относительно 0°K , когда кинетическая составляющая энергии отсутствует. Стабильная структура материала при более высоких температурах задается путем изменения значения параметра решетки материала с учетом коэффициента линейного расширения. Кинетическая составляющая изменения энергии, приходящейся на отдельный атом, при этом подходе отсутствует. Применение данного метода является оправданным в ряде случаев, так как он намного сокращает продолжительность компьютерного эксперимента.

Следующий метод - стохастический. В этом случае структурные изменения реализуются посредством перераспределения атомов и дефектов по исследуемому кристаллу случайным образом, используя методы типа Монте-Карло. При применении этого метода направление структурной перестройки регулируется изменением энергии кристалла. Активация структурной перестройки задается локальным изменением кинетической энергии атомов. Основная проблема данного метода заключается в переборе всех возможных направлений трансформаций и нахождении минимального по затрате энергии направления. Этот метод не позволяет учитывать различия между атомами компонентов по размерному фактору в многокомпонентных материалах.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОКРИСТАЛЛАХ И НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ.

Третий метод, наиболее активно применяющийся в настоящее время, называется методом молекулярной динамики. Согласно этому методу скорости смещений атомов в структуре задаются в зависимости от температуры, посредством применения статистик Больцмана или Максвелла-Больцмана. Направления структурной перестройки определяются решением системы обыкновенных дифференциальных уравнений динамики Ньютона. Данный метод позволяет исследовать фазовые превращения в материале в динамике, и при удачной постановке задачи может приближаться к исследованию реального процесса. Однако применение подобного метода требует значительного объема машинного времени. Поэтому представляется целесообразным применение комбинации перечисленных выше подходов при решении задач компьютерного моделирования структурно-энергетической перестройки, происходящей в материалах.

Важным фактором в компьютерном эксперименте является обработка получаемых результатов. Здесь требуется выделить наиболее важные параметры, по которым отслеживается компьютерный эксперимент, определить их корреляцию с данными реального эксперимента. Такими параметрами являются, например, коэффициент диффузии, температура фазового перехода порядок-беспорядок, энергия активации различных процессов, параметры ближнего и дальнего порядка и др. При этом очень важным представляется найти методы визуализации, которые позволили бы наглядно наблюдать за компьютерным экспериментом. В зависимости от задачи можно упростить компьютерный эксперимент, используя последовательно различные подходы к исследованию наноструктурных материалов, начиная с простых двумерных систем с переходом затем к слоистым двумерным системам, а далее к трехмерным структурам.

Заключение.

Таким образом, компьютерный эксперимент является третьим направлением исследований в физике конденсированного состояния, наряду с теорией и реальным экспериментом. В результате компьютерного эксперимента удалось выявить особенности структурно-фазовых превращений, имеющих место в кристаллической решетке твердого аргона на различных этапах его деформации от области упругой до полного разрушения [1,2] с использованием метода вариационной квазистатики. Применение стохастических мето-

дов позволило выявить тонкие особенности фазовых переходов типа порядок-беспорядок и роль антифазных границ в таких переходах [3,4]. С использованием метода молекулярной динамики обнаружены стадии структурно-аналитических превращений, имеющих место в системе Ni-Al при реакции самораспространяющегося высокотемпературного синтеза [5]. С использованием этого метода выявлено, что с увеличением расстояния между парами вакансий растет температура активации структурной перестройки в дивакансионный комплекс. Энергетически выгодна трансформация дивакансионных комплексов к конфигурации, состоящей из центрирующего межузельного атома и трех вакансий. Описан механизм движения полученного комплекса. Комбинация механизмов движения комплекса может происходить с образованием цепочки точечных дефектов замещения вдоль плотноупакованного направления, поворотом, разрывом и аннигиляцией цепочек точечных дефектов замещения. Подвижность дивакансионного комплекса связана, прежде всего, с подвижностью межузельного атома, наличием большего числа степеней свободы по сравнению с одиночной вакансией и точечными дефектами замещения [6].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Овчаров А.А. Моделирование перестройки ГЦК кристалла под действием деформации: Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.н.-Барнаул, 1999, 201 с.
2. Najah G.Y. Fracture studies in solid ar using computer simulation: Dissertation for degree of Candidate of Science in Physics-Mathematics.- Barnaul, 2000, 165 p.
3. Андрухова О.В. Компьютерное моделирование атомного упорядочения и фазового перехода порядок-беспорядок в бинарных сплавах стехиометрического состава: Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.н.-Барнаул, 1997, 225 с.
4. Гурова Н.М. Компьютерное моделирование термоактивируемых превращений, протекающих на антифазных и межфазных границах: Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.н.-Барнаул, 2000, 171 с.
5. Полетаев Г.М. Исследование процессов самодиффузии в двумерной системе Ni-Al: Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.н.-Барнаул, 2002, 186 с.
6. Дудник Е.А. Классификация точечных дефектов и их комплексов в двумерной гексагональной кристаллической решетке интерметаллида типа Ni₃Al: Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.н.-Барнаул, 2002, 199 с.