

The results of computer simulation of interdiffusion in binary metal system are presented. Growth and competition of intermediate phases in multiphase systems (with account of the time dependent variations of boundary concentrations) are studied.

Key words: interdiffusion, multiphase system, the interphase boundaries, Stefan problem.

Одержано редакцією 10/05/2010

Прийнято до друку 31/05/2010

УДК 669.3

Ю. О. Ляшенко, Б. Б. Страумал, С. М. Соболев

МОДЕЛЮВАННЯ СЕГРЕГАЦІЇ НА ГРАНИЦЯХ КРУТІННЯ У ДРІБНОЗЕРНИСТИХ CU-NI СПЛАВАХ

Проведено моделювання процесу сегрегації атомів Си на границі зерен системи Си-Ni на основі Монте-Карло дослідження. В якості базової моделі було вибрано модель Сроловица, яка враховує вібраційну взаємодію. У результаті моделювання отримано графіки залежностей ентальпії сегрегації та концентрації Си від номера атомної площини.

Ключові слова: сегрегація, границя зерна, бікристал, ентальпія сегрегації.

1. Вступ

Зернограничні фазові переходи змочування та передзмочування детально досліджено на бікристалах [1, 2]. У результаті було побудовано нові лінії зернограничних фазових переходів у двофазних областях на об'ємних фазових діаграмах стану. При цьому особливості впливу розміру зерен у нанокристалічному стані на положення ліній фазових перетворень та кінетики еволюції таких матеріалів залишаються неповністю дослідженими. При цьому, якщо границь розділу багато, то об'ємне співвідношення фаз буде змінюватися зі зменшенням розміру зерен, а лінії на фазових діаграмах будуть зміщуватися при переході з крупнокристалічного у нанокристалічний стан. Тому побудова моделі, яка адекватно описуватиме вплив сегрегації на границях зерен, а також утворення зернограничних фаз на положення та форму ліній об'ємних фазових перетворень у нанокристалічних матеріалах, є актуальною.

2. Теоретичні відомості

Для моделювання еволюції дрібно- та нанозернистих полікристалів бінарних сплавів необхідно розробити Монте-Карло модель росту зерен фаз з одночасним урахуванням на границях фаз та в їх околі сегрегації компонентів, що приводить до зміщення границь розчинності на діаграмах стану. Зсув границь міжфазної рівноваги у системах із великою кількістю поверхонь відбувається через різну розчинність компонентів усередині зерен та на поверхнях їх розділу. Моделювання можливо провести на основі поєднання моделі Поттса [3], що дозволяє описати рух границь зерен, та моделі Ізінга, що дозволяє описати процес сегрегації [4, 5].

Метою даного дослідження є розробка методу визначення в залежності від типу границі та відстані від границі у кожному зерні параметрів міжатомної взаємодії, що є необхідним для використання моделі Ізінга при моделюванні нанорозмірного полікристалу.

Для визначення цих параметрів у моделі бікрystalа для системи Cu-Ni із різним вмістом міді можна використати модель Сроловіца [4, 5]. Відповідно до моделі [4, 5] енергія взаємодії атомів обраховується з урахуванням трьох доданків:

$$\Omega = E + A_v - TS_c. \quad (1)$$

При цьому енергія потенціальної взаємодії атомів E моделі оцінюється за допомогою потенціалів взаємодії впровадженого атома для системи Cu-Ni [6, 7]:

$$E = \sum_{i=1}^N F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N \Phi_{ij}(R_{ij}), \quad (2)$$

де перший доданок виражає енергію впровадженого атома E_{emb} , а другий доданок виражає енергію парної взаємодії E_{pair} .

Відповідно, для даної системи запишемо, що:

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(R_{ij}), \quad (3)$$

де $\rho_j(R_{ij})$ – електронна густина атома i поблизу атома j .

Парну частину енергії взаємодії E_{pair} запишемо у вигляді:

$$E_{\text{pair}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N (c_a(i)c_a(j)\rho_{aa}(R_{ij}) + c_b(i)c_b(j)\rho_{bb}(R_{ij}) + (c_a(i)c_b(j) + c_b(i)c_a(j))\rho_{ab}(R_{ij})). \quad (4)$$

Другий доданок A_v відповідає за вібраційну взаємодію [4]:

$$A_v = k_b T \sum_{i=1}^N \sum_{\beta=1}^3 \ln \left(\frac{h\omega_{i\beta}}{2\pi k_b T} \right) \quad (5)$$

Ентропійний доданок S обраховується стандартним способом для конфігураційної ентропії:

$$S_c = -k_b \sum_{i=1}^N (c_a(i) \ln(c_a(i)) + c_b(i) \ln(c_b(i))). \quad (6)$$

3. Опис моделі

Для моделювання поставленої задачі було сформовано ГЦК кристал, який розділений на дві частини. Якщо обертати одну частину кристала відносно іншої на різні кути, то можна отримати різні типи границь зерен. Моделювання проводилося для трьох типів границь крутиння з $\sum 5$, $\sum 13$ та $\sum 61$. На рис. 1 приведено приклад такого кристала.

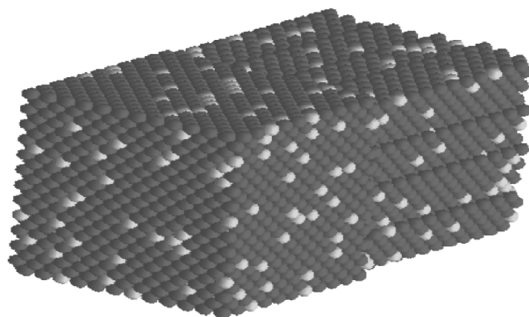


Рис. 1. Початкова конфігурація модельного кристала.

Після задання початкових умов використовується модель Монте-Карло обміну компонентами між вузлами решітки. При цьому енергія міжатомної взаємодії розраховується за формулою (1). Відповідно до Монте-Карло моделі [4] на кожному

кроці робиться спроба заміни типу атома (Cu чи Ni) у вузлах решітки. Якщо енергія системи внаслідок такого обміну зменшиться, то обмін приймається. Але, водночас, самі положення вузлів не є стаціонарними. Тобто, через певні проміжки часу випадковим чином вибирається вузол і здійснюємо його зміщення у випадковому напрямку на 0.1 міжплощинної відстані. При цьому, після перерахунку енергії за формулою (1), таке зміщення приймається або відхиляється. Такий підхід до моделювання дозволяє забезпечити рівність приведених хімпотенціалів у кожній точці бікристиала, який містить границю крутіння, що дозволяє розрахувати рівноважні характеристики системи у кожній точці бікристиала.

4. Результати

У результаті модельних розрахунків отримано залежності концентрації Cu від порядкового номера атомної площини (рис. 2) у системі координат, яка зв'язана із границею бікристиала.

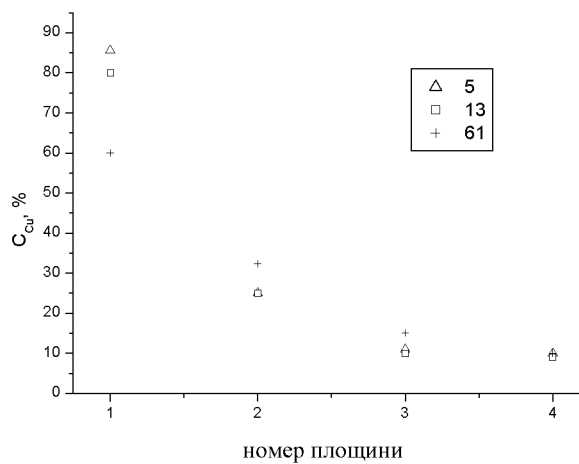


Рис. 2. Залежність концентрації Cu від номера атомної площини.

Також проведено розрахунки залежності ентальпії сегрегації (рис. 3) від відстані до границі бікристиала.

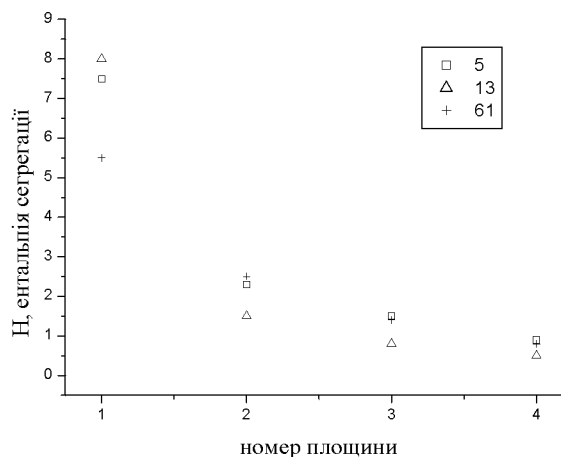


Рис. 3. Залежність ентальпії сегрегації від номера атомної площини.

5. Висновки

У результаті моделювання показано, що атоми Cu у даній системі локалізуються на границі зерен бікристала (рис. 2), що є природнім, зважаючи на залежність ентальпії сегрегації (рис. 3) від номера атомної площини. Відповідно до даної моделі, спостерігається різниця у залежностях (рис. 2 і рис. 3) для різних типів границь. Вказані залежності можуть бути використані для моделювання методом Монте-Карло сегрегації атомів Cu у полікристалічних нанокристалах системи Cu-Ni.

Подяки

Автори висловлюють подяку за підтримку Державному фонду фундаментальних досліджень України (проект “ДФФД – РФФД – 2009”).

Література

1. Страумал Б.Б. Фазовые переходы на границах зерен. – Москва. – Наука. – 2003. – 327 с.
2. Straumal B. Increase of Mn solubility with decreasing grain size in ZnO / B. Straumal, B. Baretzky, A. Mazilkin, S. Protasova, A. Myatiev, P. Strauman // Journal of the European Ceramic Soc. – 2009. – Vol. 29. – P. 1963–1970.
3. Hu X. Mechanisms of amorphous– phase– dependent grain grown in two– phase nanocomposite films: a Monte Carlo analysis. / X. Hu, Z. Liu, Y. Shen // Applied Phys. Letters. –2008. – Vol. 92. – P. 021910.
4. Najafabadi R. A new method for the simulation of alloys: application to interfacial segregation / R. Najafabadi, H.Y. Wang, D. J. Srolovitz, R. Lesar // Acta metal. mater. –1991.– Vol. 39.– P. 3071–3082.
5. Najafabadi R. Segregation to and structure of [001] twist grain boundaries in Cu– Ni alloys / R. Najafabadi, H.Y. Wang, D. J. Srolovitz // Acta metal. mater. – 1993. – Vol. 41. – P. 2533–2546
6. Byeong– Joo L. Semiempirical atomic potentials for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al, and Pb based on first and second nearest– neighbor modified embedded atom method / L. Byeong– Joo, S. Jae– Hyeok, M. I. Baskes // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68.– P. 144112.
7. Bonny G. Fitting interatomic potentials consistence with thermodynamics: Fe, Cu, Ni and their alloys / G. Bonny, R. C. Pasianot, L. Malerba // Phil. Mag. –2009. – Vol. 89. – P. 3451–3464.

Аннотация. Ю.А.Ляшенко, Б.Б.Страумал, С.М.Соболь, *Моделирование сегрегации на границах кручения в мелкозернистых Cu-Ni сплавах. Проведено моделирование процесса сегрегации атомов Cu на границе зерен системы Cu-Ni на основе Монте-Карло исследования. В качестве базовой модели выбрана модель Сроловица, которая учитывает вибрационное взаимодействие. В результате моделирования получены графики зависимостей энтальпии сегрегации и концентрации Cu в зависимости от номера атомной плоскости.*

Ключевые слова: сегрегация, граница зерна, бикристалл, энтальпия сегрегации.

Summary. Yu.A.Lyashenko, B.B.Straumal, S.M.Sobol, *Modelling of segregation on the torsion boundaries on fine-grained Cu-Ni alloys. Segregation of copper atoms at the grain boundary of Cu-Ni alloy is simulated by Monte Carlo method. Srolovits model taking into account the interaction of vibration was chosen as a basic model. Dependences of segregation enthalpy and Cu concentration on the atomic plane number have been obtained.*

Key words: segregation, grain boundary, bicrystal, enthalpy.

Одержано редакцією 15/05/2010

Прийнято до друку 31/05/2010