

УДК 538.911

DOI: 10.17223/00213411/62/4/119

А.Р. ХАЛИКОВ¹, Е.А. ШАРАПОВ², Е.А. КОРЗНИКОВА^{1,3}, А.И. ПОТЕКАЕВ^{4,6},
М.Д. СТАРОСТЕНКОВ⁵, Э.В. ГАЛИЕВА³, С.В. ДМИТРИЕВ^{3,6}

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ В ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВАХ*

Методом молекулярной динамики для представительного объема вещества удастся рассчитать траектории атомов на временных интервалах порядка 1 нс, что не позволяет изучать такие медленные процессы, как диффузия. Данная проблема может быть решена с использованием метода Монте-Карло, который с успехом применяется к изучению процессов, контролируемых диффузией, например переходов порядок – беспорядок в сплавах или диффузионной сварки разнородных металлов через прокладку. Подавляющее большинство работ выполнено для бинарных сплавов, в то время как на практике широко применяются сплавы с большим числом компонент. Представлена теоретическая модель, позволяющая изучать процессы диффузии в трехкомпонентных сплавах по вакансионному механизму в приближении твердых сфер. Выписано соотношение для расчета потенциальной энергии сплава, которое конкретизировано для случая полностью разупорядоченного сплава. Разница этих энергий выражена через энергии упорядочения и параметры порядка. Предложенная модель применима для кристаллических решеток любой размерности. Дается пример ее использования для трехкомпонентного сплава стехиометрии A_2BC , атомы которого занимают узлы двумерной квадратной решетки.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, диффузия, металл, сплав.

Введение

Многие процессы в кристаллических твердых телах контролируются диффузией, например фазовые переходы порядок – беспорядок в упорядочивающихся сплавах [1], диффузионная сварка металлов [2], эволюция структуры металлов при отжиге и старении и др. Оказывается, что метод молекулярной динамики не в состоянии описать данные процессы, поскольку характерные времена моделирования этим методом составляют 1 нс, что, по крайней мере, на 10–12 порядков меньше характерных времен упомянутых выше процессов. На помощь приходит метод Монте-Карло, который давно и с успехом применяется при изучении диффузии, приводящей к эволюции дефектов и структуры сплавов [3–18]. В ранних работах исследовалась кинетика фазовых переходов порядок – беспорядок в модельных бинарных сплавах на двумерных решетках [3–5]. В работе [6] решена задача описания всех возможных энергетических состояний бинарных сплавов на основе простой кубической, ОЦК- и ГЦК-решеток. Для бинарного сплава состава $A_{1-x}B_{1+x}$ в модели твердых сфер и парных связей были получены условия, накладываемые на энергии парных связей, при которых избыток компоненты B выделяется в виде либо твердого раствора, либо частиц чистой фазы [7]. Иллюстрирующие примеры даны для сверхструктур $B2$ и $L1_0$ [7]. Допустимые изменения параметров дальнего порядка для двумерных структур стехиометрических составов A_2B , A_3B , A_3B_5 были описаны в [8]. В цикле работ [9–18] для бинарных сплавов на трехмерных решетках рассматривались такие вопросы, как влияние концентрации вакансий на слабоустойчивые предпереходные структурно-фазовые состояния, влияние одноосной деформации растяжения-сжатия и планарных дефектов (антифазных границ) на структурно-энергетические характеристики сплавов.

Отметим, что значительная часть работ была выполнена для бинарных сплавов [3–18], в то время как для практики большое значение имеют многокомпонентные системы.

Для многокомпонентных систем разработаны и применяются методы, сочетающие алгоритм перестановок атомов по методу Монте-Карло с релаксационной или молекулярной динамикой или с первопринципным моделированием. Эффективный алгоритм параллельных вычислений для анализа выделения различных фаз в многокомпонентных системах был предложен авторами работы [19]. В [20] для тройной системы Pt–Pd–Rh методом молекулярной динамики в сочетании с мо-

* Е.А. Корзникова выражает признательность за поддержку РФФИ, грант № 18-32-20158 мол_а_вед (обсуждение результатов моделирования). С.В. Дмитриев благодарит РФФИ, грант № 17-02-00984 (постановка задачи). Работа Э.В. Галиевой была поддержана грантом Российского научного фонда № 18-19-00685 (обсуждение результатов моделирования и перспектив использования предложенной модели). Работа частично поддержана госзаданием ИПСМ РАН.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>