

# ДЕТАЛИ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ АМОРФНЫХ БИНАРНЫХ СИСТЕМ. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

В.Б. Каширин

Исследование структуры и свойств многокомпонентных аморфных систем представляет весьма актуальную задачу, так как практически все аморфные материалы являются сплавами, содержащими две и более компонента. Экспериментальное исследование деталей тонкой структуры аморфных бинарных сплавов представляет серьезную проблему так как для нахождения трех парциальных дебаевских структурных факторов требуются три независимых эксперимента по рассеянию либо рентгеновских лучей, электронов и нейтронов, либо рентгеновские лучи плюс два нейтронных эксперимента на разных изотопах, что резко сужает интервал исследуемых материалов и усложняет их интерпретацию. Кроме того, картина рассеяния позволяет получить только интегральные характеристики структуры, а исследование тонких локальных деталей в эксперименте вообще проблематично.

Компьютерное моделирование структуры и свойств аморфных металлов и сплавов позволяет, напротив, получить полную информацию о системе, для которой заданы потенциалы взаимодействия

В настоящей работе приведены результаты компьютерного моделирования структуры и свойств бинарного аморфного интерметаллида  $Ni_3Al$  [1].

С использованием потенциалов Морзе, построенных в работе [2] для сплава  $Ni_3Al$  и оригинальной компьютерной методики построения аморфных структур, описанной в [3], был построен кластер из 50000 атомов и рассчитаны практически все статические структурные характеристики, и в первую очередь парные корреляционные функции А-А, А-В и В-В, а также дополнительные корреляции Бхатъя-Торнтон типа концентрация-концентрация  $W_{CC}$ , плотность - концентрация  $W_{NC}$  и плотность-плотность  $W_{NN}$  [4].

Алгоритм построения бинарной модельной структуры кратко может быть описан следующим образом. Все пространство разбивалось на 8 октантов. Первый атом помещался в начало координат. Все последующие случайным образом размещались по восьми октантам близко к поверхности уже построенного кластера. Сорт атома также выбирался генератором случайных чисел в соответствии с заданной концентрацией. Следующим ша-

гом являлась минимизация энергии добавляемого атома в суммарном силовом поле прилегающих атомов. Число этих атомов определяется радиусом взаимодействия, который в свою очередь определяется видом потенциала взаимодействия. Так для использованного в работе потенциала Морзе радиус взаимодействия принимается равным  $5\div 6A$ , а число атомов, попадающих в сферу взаимодействия составляет  $\sim 10^2\div 10^3$ , что приводит к значительным вычислительным затратам. Используемые в работе потенциалы в соответствие с обозначениями работы [2] могут быть представлены в виде:

$$V_{mn}(r) = D_{mn} \beta_{mn} \left( \alpha_{mn} e^{-2\alpha_{mn}r} - 2e^{-\alpha_{mn}r} \right) \quad (1),$$

$D_{mn}$ ,  $\beta_{mn}$ ,  $\alpha_{mn}$  подгоночные константы.

На рисунке 1 представлены потенциалы Морзе (1) для рассматриваемой системы. Взаимодействие Ni-Al является самым сильным, а соответствующий потенциальный минимум самым глубоким.

Построенный таким образом кластер подвергался релаксации с использованием метода прямой безградиентной минимизации энергии аморфной структуры [4]. Для отрелаксированной структуры были рассчитаны все статические структурные характеристики такие как парные и угловые парциальные корреляционные функции, парциальные распределения ближайших соседей, а также весь набор парциальных микронапряжений.

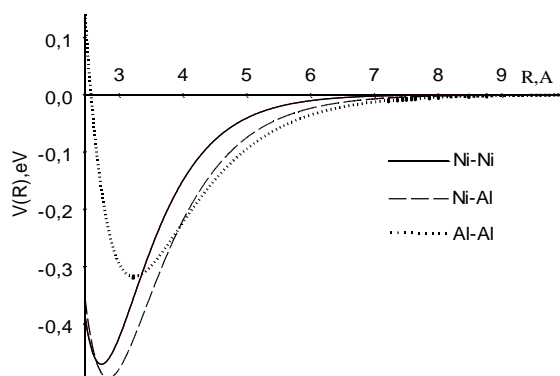


Рисунок 1 – Зависимость потенциалов Морзе (1) от расстояния для сплава  $Ni_3Al$

В бинарном сплаве  $Ni_3Al$  существуют три парциальные корреляционные функции  $W_{Ni-Ni}(R)$ ,  $W_{Ni-Al}(R)$ ,  $W_{Al-Al}(R)$  и три корреляционные функции Бхатъя-Торнтон [5]  $W_{NN}(R)$ - корреле-

ляционная функция плотность-плотность,  $W_{NC}(R)$  плотность-концентрация и  $W_{CC}(R)$  концентрация-концентрация.

Особый интерес представляет корреляционная функция  $W_{CC}$ , пропорциональная обобщенному параметру химического ближнего порядка Уоррена [5]. По определению  $W_{CC} < 0$  там, где преобладают разноименные корреляции и  $W_{CC} > 0$  в остальных случаях. Расчет выявил существование явного химического упорядочения в первой координационной сфере модельного кластера, как и должно быть для интерметаллида рисунк 2.

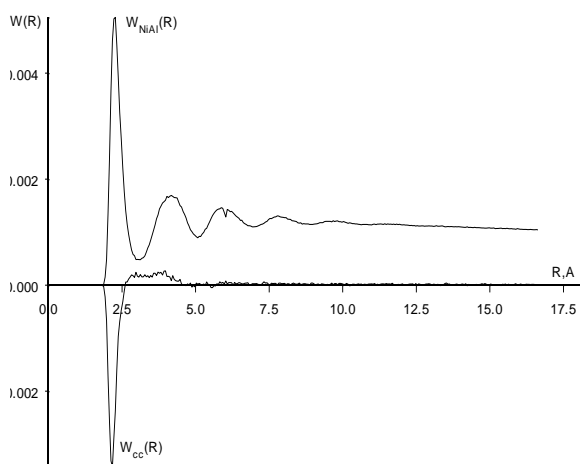


Рисунок 2 – Парциальная корреляционная функция NiAl и корреляция Бхаттья – Торнтонна типа концентрация-концентрация

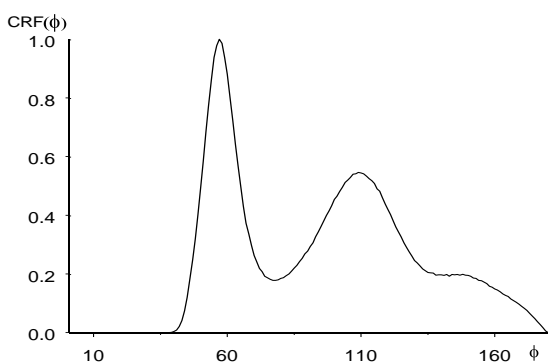


Рисунок 3 – Полная угловая корреляционная функция аморфного сплава Ni<sub>3</sub>Al

Детали тонкой структуры ближнего порядка исследовались с помощью угловой корреляционной функции и положение её первого максимума  $\sim 58^\circ$  указывает на то, что ближайшее окружение состоит из почти правильных, несколько сжатых за счет дальнего действующего притяжения потенциала Морзе тетраэдров. Второй максимум  $\sim 110^\circ$  соответ-

ствует углу между ребрами двух сопряженных тетраэдров. Следует отметить, что все парциальные угловые корреляционные функции имеют максимумы на этих же или близких углах. Последнее обстоятельство доказывает тот факт, что ближайшее окружение состоит из тетраэдров независимо от сорта атомов и, соответственно, их размера.

В отличие от правильных кристаллических решеток, в которых число ближайших соседей равно 8 или 12, в аморфных структурах число ближайших соседей не является константой. Для большинства аморфных структур число ближайших соседей равно 13, в среднем [6], тем не менее существует целый набор координационных чисел, который удобно представлять в виде гистограммы. На рисунке 4 приведена одна из таких гистограмм, отображающая распределение полного числа ближайших соседей без учета сорта атомов. Слабый максимум приходящийся на 8 соответствует приповерхностным атомам, которые не имеют полного окружения. Относительная малость побочного максимума обусловлена большими размерами кластера и соответственно малым вкладом поверхности. Наряду с атомами имеющими малое координационное число в кластере существуют микрофлуктуации плотности в которых число ближайших соседей достигает 15-16 и даже 17. Следует отметить, что эти флуктуации не исчезают даже после продолжительной релаксации в 400-500 глобальных итераций.

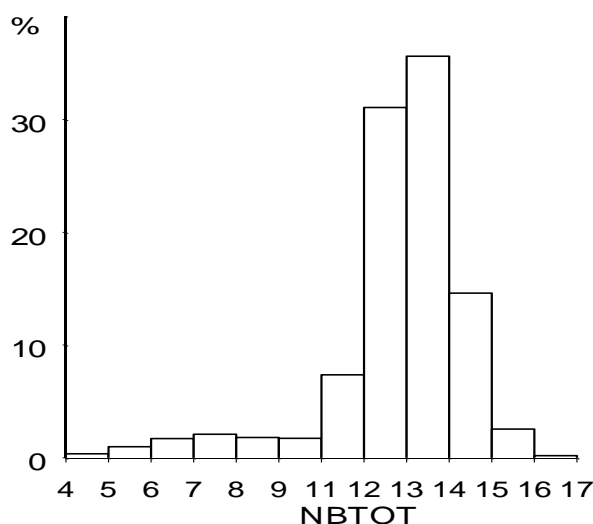


Рисунок 4 – Гистограмма распределения полного числа ближайших соседей в кластере из 50000 атомов Ni<sub>3</sub>Al

Особый интерес представляет расчет микронапряжений на атомарном уровне в

модельном кластере [7, 8] и в первую очередь инвариантов тензора напряжений: гидростатического давления  $p = \frac{1}{3}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)$  и сдвиговых напряжений фон Мизеса (отклонение от сферичности)

$$\tau = \left[ \frac{1}{3} \left\{ \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)^2}{2} + \frac{(\sigma_1 - \sigma_3)^2}{2} + \frac{(\sigma_2 - \sigma_3)^2}{2} \right\} \right]^{1/2},$$

где  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ , три главных значения тензора напряжений. На рисунках 5 и 6 приведены гистограммы распределения указанных парциальных величин.

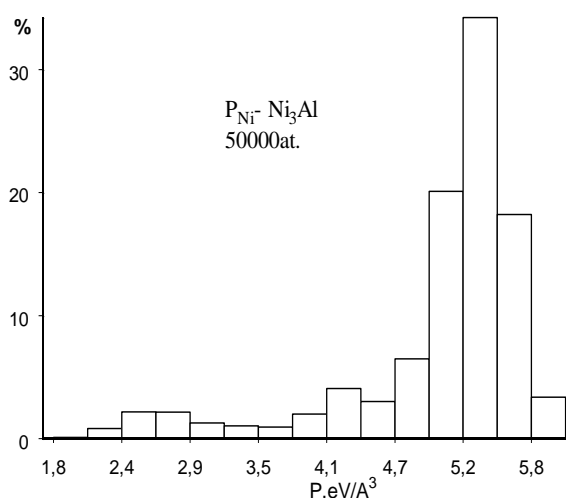


Рисунок 5 – Гистограмма распределения парциального (для Ni) гидростатического давления в кластере из 50000 ат

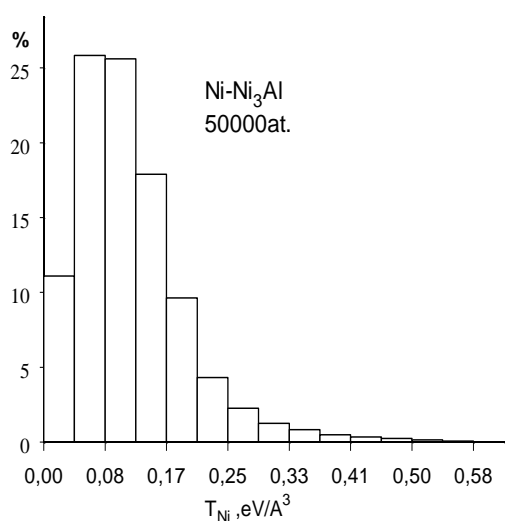


Рисунок 6 – Гистограмма распределения парциального (для Ni) сдвигового напряжения фон Мизеса в кластере из 50000 ат

Распределение гидростатического давления на рисунке 5 однозначно указывает на то, что модельный кластер отрелаксирован достаточно хорошо, так как распределение имеет высокий и узкий максимум, и дисперсия его невелика. Качественно схожий характер имеет и распределение сдвигового напряжения. В целом, результаты компьютерного исследования структуры и свойств аморфного сплава  $Ni_3Al$  носят оригинальный характер и могут быть полезными при интерпретации экспериментальных данных [1]

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коротаев А.Д., Тюменцев А.Н. Аморфизация металлов методами ионной имплантации и ионного перемешивания // Изв. вузов. Физика. - 1994. -3. -Т37. -N8. -С.3-31.
2. Старостенков М.Д., Козлов Э.В., Попов Л.Е. Применение потенциала Морза в теории атомного упорядочения и расчет атомных конфигураций точечных, линейных и плоских дефектов // Тезисы IV Всесоюзного совещания по упорядочению атомов и его влиянию на свойства сплавов. - Томск: Изд-во Томск. Ун-та. - 1972. - С. 71-73.
3. Kashirin V.B., Kozlov E.V. New approach to the dense random packing of soft spheres. Dependence of model characteristics on potential shape. // J. Non-Cryst. Solids 163, (1993) pp.24-28.
4. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. М. Мир. - 1975. - 534с.
5. Ж. Садок, Х. Вагнер Эксперименты по дифракции нейтронов и рентгеновских лучей на металлических стеклах. В сб. Металлические стекла. Вып. II Атомная структура и динамика, электронная структура, магнитные свойства. М. Мир 1986. 454с
6. Металлические стекла Ионная структура, электронный перенос и кристаллизация. Под ред. Г. Гюнтеродта и Г. Бека. - М.: Мир 1983г. - 376с.
7. Egami T. and Vitek V. Local structural fluctuations and defects in metallic glasses. J. Non-Cryst. Solids.// -1984. -V61&62. -p.499-510.
8. Srolovitz D., Vitek V., Egami T. An atomistic study of deformation of amorphous metals. //Acta Met. -V31, -N2. -1983. -p. 335-352.

*Томский архитектурно-строительный университет*