



Тверской государственный университет, кафедра общей физики

Автор: Вересов Сергей Александрович

Руководитель: к.ф.-м.н., доцент Сдобняков Н.Ю.

Актуальность: При переходе к нанометровому диапазону размеров физико-химические свойства металлов и сплавов, с одной стороны, могут иметь сильную размерную зависимость; с другой стороны, они могут проявлять особые термодинамические, оптические, электрические, магнитные и даже биологические свойства. Сплавы на основе наноразмерных объектов имеют широкие перспективы применения в нанoeлектронике, физическом материаловедении, теории распространения э/м волн в веществе. Для применения наноразмерных элементов в нанoeлектронике, требуется знать свойства наночастиц и их структурные параметры. Интересным практическим применением является получение зонных структур, которые были обнаружены как на основе результатов моделирования, так и в экспериментальных исследованиях.

Цель работы: Целью данной работы является проведение моделирования методом молекулярной динамики и анализ изменения структуры тернарного титансодержащего сплава (Ti_6Al_4V) нанометрового размера в процессе охлаждения, а также определение температуры стеклования.

Методика моделирования: метод молекулярной динамики, метод компьютерного моделирования, потенциал взаимодействия – потенциал сильной связи, температура стеклования-эмпирический параметр.

В развитие наших работ мы продолжаем изучение возможных сценариев структурообразования (см. рис. 1 и 2, скорости охлаждения существенно ниже порогового значения $1,6 \text{ TK/c}$). Установлено, что в обоих случаях имело место поверхностная сегрегация атомов; степень упорядоченности конечной структуры в большей степени определяется скоростью охлаждения, чем температурой.

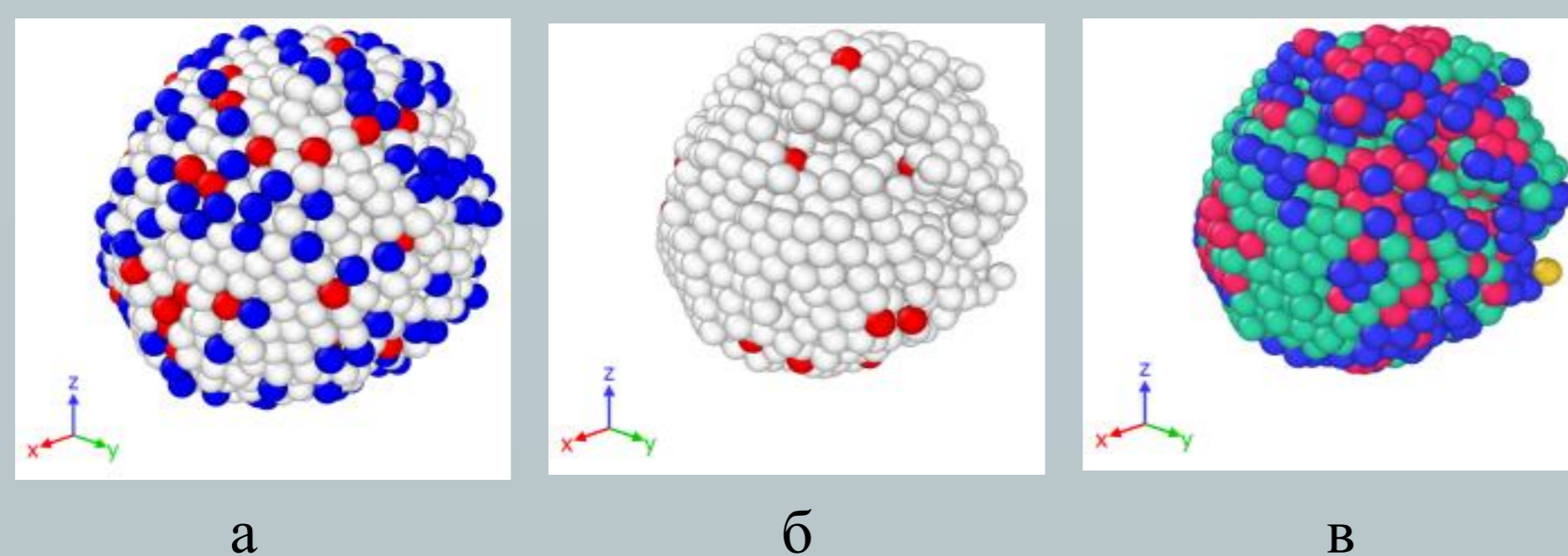


Рис. 2 Наночастица, полученная при охлаждении нанокapли до 720 K $dT/dt=0,4 \text{ TK/c}$. Остальные обозначения совпадают с рис. 1.

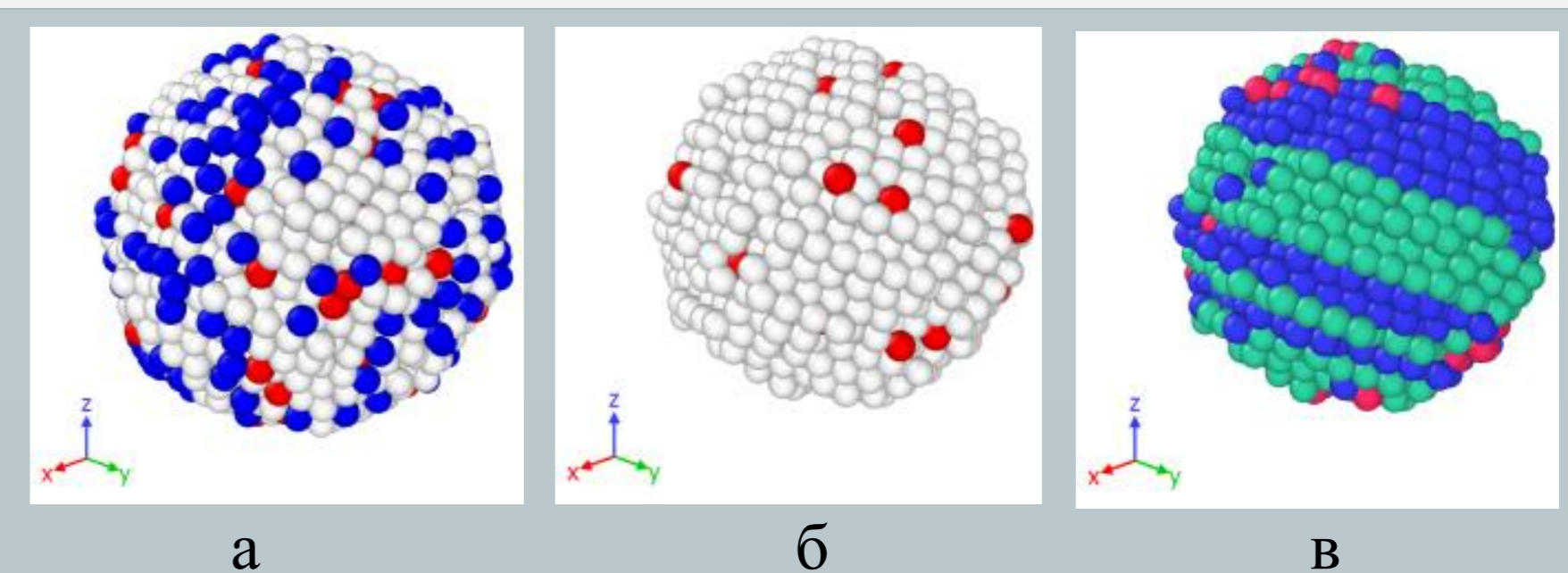


Рис. 1. Наночастица, полученная при охлаждении нанокapли до 785 K ; $dT/dt=0,1 \text{ TK/c}$: а – оболочка наночастицы и б – ядро наночастицы, распределение атомов по химическим элементам (синий цвет – Al, белый цвет – Ti, красный цвет – V); в – ядро наночастицы, распределение атомов по типам кристаллического окружения (зелёный цвет – ГЦК, синий цвет – ОЦК, красный цвет – ГПУ, желтый цвет – ИК).

Выводы:

1. Исследованы температурные зависимости для различных сценариев структурных превращений кристаллических структур, основанные на скорости охлаждения, в тройном титановом сплаве. В частности, $\beta \rightarrow \alpha$ переход наблюдался с изменением температуры системы. Результаты указывают на возможное качественное изменение свойств сплава Ti_6Al_4V при его использовании в форме наноразмерных частиц.
2. Показано, что при формировании тройных сплавов скорость охлаждения системы является основным фактором, определяющим формирование окончательной внутренней структуры. По нашим оценкам, пороговое значение скорости охлаждения составляет $1,6 \text{ TK/c}$. Этот параметр определяет принципиально разные сценарии процессов структурообразования. Если это пороговое значение соблюдается, это приводит к изменению плотности упаковки атомов, а также соотношению кристаллической и аморфной фаз. Интересно, что атомы V, которые должны действовать как фазовый β -стабилизатор, по-видимому, теряют эту способность в случае наноразмерных сплавов. Этот эффект также имел место при скорости охлаждения $1,6 \text{ TK/c}$ и ниже. Процесс поверхностной сегрегации атомов Al при сверхбыстром охлаждении может быть завершён лишь частично, если время релаксации системы недостаточно.
3. Определён диапазон температур аморфизации для сплава Ti_6Al_4V . и установлена слабая зависимость температуры аморфизации от скорости охлаждения.