Summary. ***V.M. Bezpalchuk. Molecular dynamics simulations of deposition in Ni-Al system.*** *The paper presents a numeric model of the deposition by means of molecular dynamics simulations, using embedded-atom method (EAM) type potential. Simulation for Ni deposition on Al substrate was investigated in this work. The state dependence of the contact zones of Ni and Al on the deposition conditions (temperature, flux density) are found.*

Keywords: molecular dynamics, Ni-Al system, deposition, solid solution, nanometric metallic layer, embedded atom model, radial distribution function.

Одержано редакцією 26/07/2013 Прийнято до друку 08/08/2013

УДК 538.9 PACS 68.35 bd

С.В. Марченко

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ КОНЦЕНТРАЦІЇ НІКЕЛЮ У СИСТЕМІ NI-AL НА ЇЇ ІНТЕРВАЛ ПЛАВЛЕННЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

У роботі представлена комп'ютерна модель процесу плавлення системи Ni-Al із заданими концентраціями компонентів. Показано вплив концентрації нікелю на точку температурний інтервал плавлення даної системи. Запропоновано модель для встановлення точки умов плавлення системи Ni-Al.

Ключові слова: молекулярна димаміка, бінарна система, плавлення, LAMMPS.

Вступ

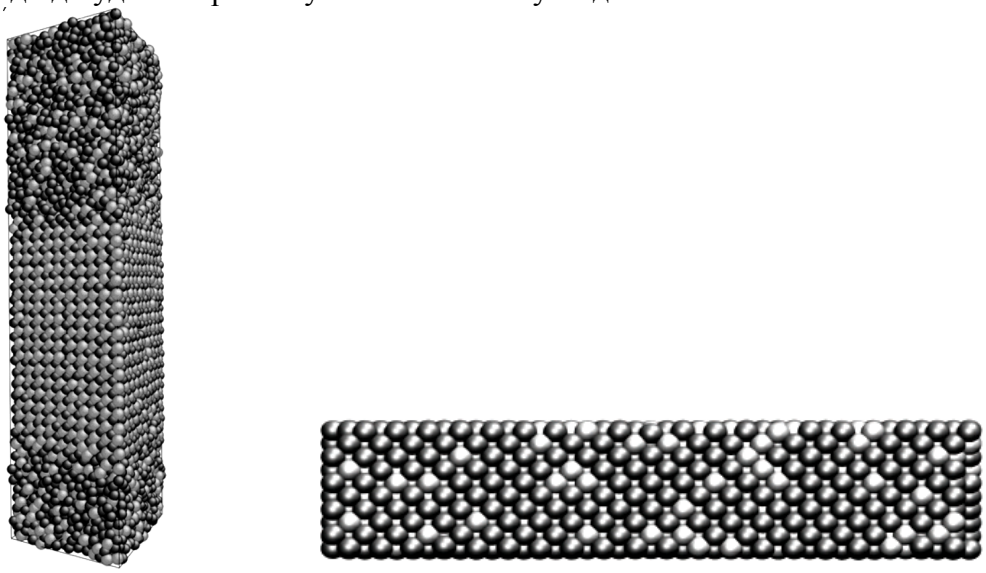
У зв'язку з дешевизною та високою продуктивністю самопоширюваний високотемпературний синтез (СВС), використовується для створення цілого ряду композитних матеріалів, у тому числі алюмінідів та інтерметалідів. Експлуатаційні характеристики таких матеріалів дозволяють їх використання у багатьох галузях сучасної промисловості [1,2,3]. Широка сфера технологічного застосування інтерметалічних алюмінідів пояснюється їх механічними властивостями, в першу чергу, високим опором оксидизації та корозії. Також маючи відносно низьку густину, такі структури здатні зберігати міцність та жорсткість при високих температурах [4].

Відомо, що СВС-реакції в системі Ni-Al суттєво залежать від умов приготування та подальшого зберігання фольг. Виникає питання, як дані умови можуть вплинути на термодинамічні характеристики отриманого зразка, зокрема, на інтервал температур плавлення системи.

Найбільш популярним підходом для моделювання процесу плавлення та відстежування інтервалу плавлення бінарної системи є використання так званих «сендвіч»-систем. Наприклад, в [5] розглядається система «solid-liquid-solid», а в [6] – система «liquid-solid-liquid» (рис. 1а). Завдяки періодичним умовам за всіма напрямками отримується нескінченна мультишарова система. На початку кожен прошарок релаксує при відповідних температурах (нижче та вище точки плавлення).

Використовується ансамбль зі сталою температурою (NVT або NPT). Потім прошарки інтегруються в єдину «сендвіч-систему», яка врівноважується за допомогою NVE-ансамблю.

З іншого боку, в [7] розглядається альтернативний підхід. Він передбачає створення решітки, сорт атомів у вузлах якої випадково визначається відповідно до заданої концентрації (рис. 1б). Параметр решітки визначається за законом Вегарда. Саме такий підхід буде використовуватися в нашому моделюванні.



а б

Рис. 1. Підходи до моделювання плавлення бінарної системи
(а) «сендвіч»-система, (б) система з випадковим розподілом атомів у вузлах решітки.

Якісна оцінка впливу концентрації нікелю у системі Ni-Al

Для якісного встановлення факту зниження температури плавлення системи Ni-Al залежно від концентрації нікелю в ній, виконано моделювання методом молекулярної динаміки в середовищі LAMMPS [8]. Візуалізацію результатів здійснено за допомогою OVITO [9]. Розглядається зразок із розмірами 20x10x10 елементарних комірок, атоми якого знаходяться у вузлах ГЦК-решітки, а сорт атома у відповідному вузлі встановлюється випадковим чином залежно від заданої концентрації нікелю (рис. 2).

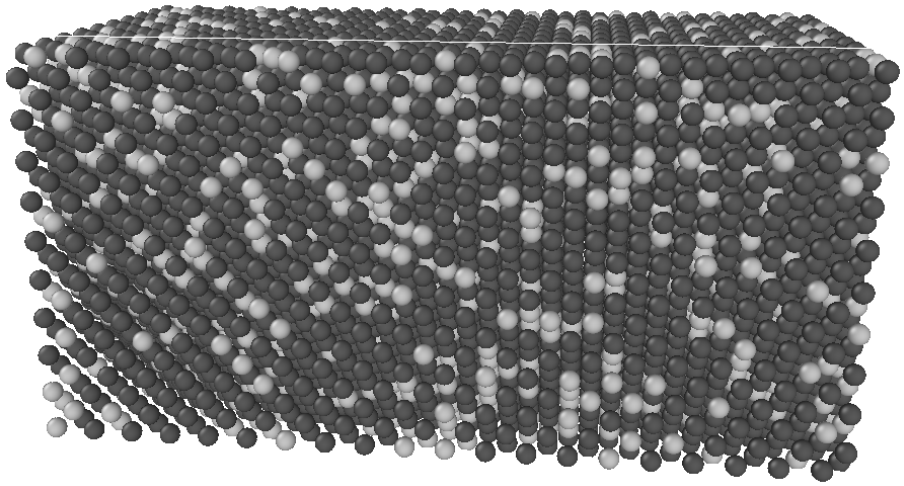


Рис. 2. Початковий зразок системи Ni-Al, концентрація нікелю – 20% (світлосірий), ГЦК-решітка, площина <100>.

Періодичні граничні умови використовуються в напрямку OX та OY. По вісі OZ встановлено специфічну для LAMMPS (shrink-wrapped) граничну умову. Її суть зводиться до того, щоб охопити всі атоми в напрямку z, незалежно від того, як далеко вони знаходяться. Відбувається поступовий нагрів системи в NVT-ансамблі від 500 К до 1200 К протягом 500 пс, у процесі якого спостерігається різкий стрибок потенціальної енергії системи, який використовується у якості ознакои зміни її фазового стану (рис. 3).

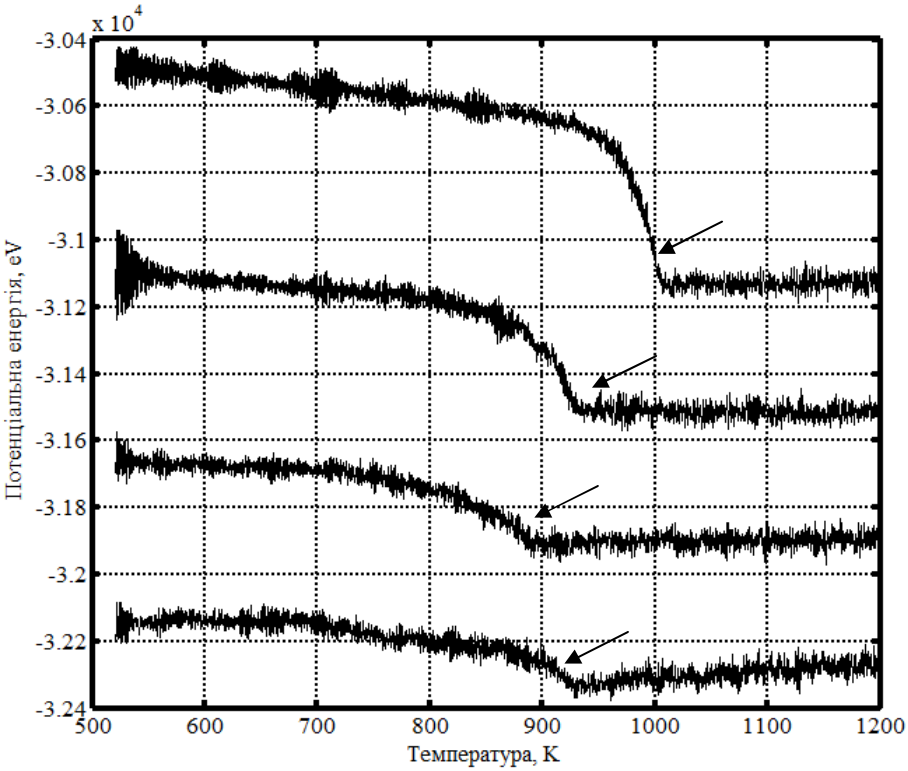


Рис. 3. Залежність потенціальної енергії системи від температури для різних концентрацій нікелевого компоненту. На графіках згори донизу концентрація нікелю дорівнює 10%, 20%, 30% і 40% відповідно.

На рис. 3 зображено залежність потенціальної енергії від температури зразка для різних концентрацій нікелю. Як свідчать графіки, відбувається поступове зміщення інтервалу температур плавлення в напрямку зниження при збільшенні концентрації нікелю до 30%. При подальшому збільшенні долі Ni спостерігається зростання температури плавлення, що узгоджується з феноменологічними оцінками контактного плавлення для відповідного фазового складу [10]. Також слід звернути увагу, що на графіках присутня різниця між результатми моделювання та феноменологічними оцінками, що спричинено, на нашу думку, наближеною природою використаного потенціалу та обчислень даним методом молекулярної динаміки.

Кількісна оцінка впливу концентрації нікелю в системі Ni-Al

Для уточнення значення точки плавлення попередню моделювання проводилося у кілька етапів:

I. **Формування двофазної області.** Із заданого зразка утворюється двофазна область шляхом поділу його навпіл та нагріву однієї частини до 300 К, а іншої – до 1200 К (рис. 4) протягом 200 пс. Використовуються періодичні граничні умови за всіма напрямками та ансамбль NVT.

II. **Релаксація зразка.** Змінюємо ансамбль на NPT та встановлюємо цільовий тиск 0 бар, моделювання виконується протягом 100 пс. Задається початкова температура, при якій буде релаксувати зразок.

III. **Встановлення рівноважної температури.** Виконуємо обчислення в NVE-ансамблі протягом 5 нс. Враховуючи температурні флуктуації системи в процесі обчислень, значення інтервалу плавлення обирається шляхом усереднення температур за останні 2 нс обрахунків.

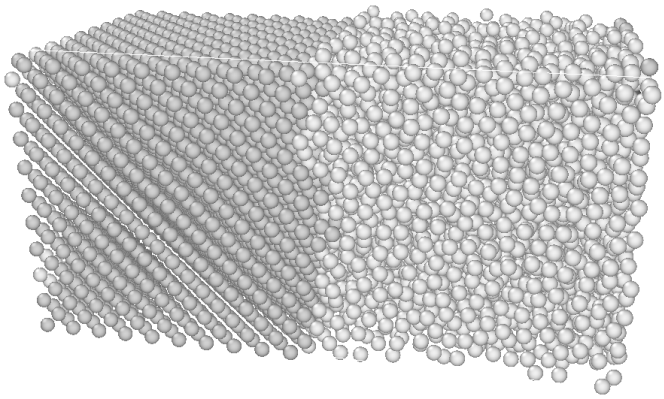


Рис. 4. Структура двохфазної області: зліва – тверда фаза, справа – рідка.

Результати

Встановлено ефект зниження температури плавлення системи Ni-Al відповідно до зростання нікелевого компоненту в ній до 30%. Виконано обчислення відповідно до розглянутих моделей: утворено двофазну область, яка релаксує, а її температура прямує до рівноважного значенння. Покладаючи дані про температуру плавлення системи Ni-Al, які отримано з феноменологічного моделювання [10] точними, маємо відносну похибку вимірів температури плавлення методом молекулярної динаміки близько 9%. Аналогічне значення похибки характерне і для зразка з чистого алюмінію, температура плавлення якого трохи перевищує 1000 К.

Висновки

Методом молекулярної динаміки показано, що додавання нікелю в алюміній у межах від нуля до 30 відсотків понижує температури лікувідуса і солідуса, тобто полегшує плавлення. Результати узгоджуються з феноменологічним моделюванням за даними CALPHAD і підтверджують можливість метастабільного контактного плавлення на контакті між чистими нікелем і алюмінієм.

Подяки

Автор вдячний проф. А.М. Гусаку та доц. О.О. Богатирьову за постановку задачі, консультації під час її розв'язання та обговорення результатів.

Література

1. Sikka V. K., Mavity J. T., Anderson K. Processing of nickel aluminides and their industrial applications // Materials Science and Engineering A. – 1992. – V. 153. – P. 712-721.

2. Sugumi Shiomo, Masao Miyake, Tetsuji Hirato, Akihiro Sato. Aluminide Coatings Fabricated on Nickel by Aluminium Electrodeposition from $DMSO_2$-Based Electrolyte and Subsequent Aneealing // Materials Transactions. – 2011. – V. 52. – P. 1216-1221.

3. Kumar K. G., Anand T. A Novel Intermetallic Nickel Aluminide (Ni_3Al) as an Alternative Automotive Body Material // International Journal of Engineering & Technology. – 2008. – V. 11. – P. 208-215.

4. Yu Y., Zhou J., Chen J., Zhou H., Guo C., Guo B. Preparation, microstructure and tribological properties of Ni3Al intermetallic compound coating by laser cladding // Intermetallics. – V. 18. – P. 871-876.

5. Yang Hong, Lü Yongjun, Chen Min, Guo Zeng Yuan A molecular dynamics study on melting point and specific heat of Ni_3Al alloy // Science in China Series G: Physics, Mechanics & Astronomy. – 2007. – V. 50. – P. 407-413.

6. Purja Pun G.P., Mishin Y. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system // Philosophical Magazine. – 2009. – V. 89. – P. 3245-3267.

7. Chen Gang, Zhang Peng, Liu HongWei. Analysis of Pd-Ni Nanobelts Melting Process Using Molecular Dynamics Simulation // Journal of Nanomaterials. – 2013. – V. 2013. – P. 1-7.

8. LAMMPS. Users Manual. Sandia National Laboratories. – 2014. – 1284 p.

9. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool Modelling // Simul. Mater. Sci. Eng. – 2010. – V. 18. – P. 015012.

10. Private communication with Rumar O.

Аннотация. ***С.В. Марченко. Исследование влияния концентрации никеля в системе Ni-Al на ее интервал плавления методом молекулярной динамики.***

В работе представлена компьютерная модель процесса плавления системы Ni-Al с заданными концентрациями компонентов. Показано влияние концентрации никеля на температурный интервал плавления даной системы. Предложено модель для установления температуры плавления системы Ni-Al.

Ключевые слова: молекулярная динамика, бинарная система, температура плавления, LAMMPS.

Summary. ***S.V. Marchenko. Influence of nickel content in aluminum on the melting interval – modeling by MD.*** Computer model of the Ni-Al system melting at various contents of nickel is presented. Concentration of nickel is shown to influenxe the melting temperatures. Model for determining the melting of Ni-Al, is presented.

Keywords: molecular dynamics, binary system, melting temperature, LAMMPS.

Одержано редакцією 17/07/2013 Прийнято до друку 30/07/2013