

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОКЛАСТЕРОВ КОБАЛЬТА В ПРОЦЕССЕ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Н.Ю. Сдобняков¹, В.С. Мясниченко², А.Ю. Колосов¹, Д.Н. Соколов¹

¹Тверской государственной университет, Тверь, Россия;

²Алтайский государственный технический университет, им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия;
E-mail: nsdobnyakov@mail.ru

THE INVESTIGATION OF THE STRUCTURAL CHARACTERISTICS EVOLUTION FOR COBALT NANOCLUSTERS DURING MELTING AND CRYSTALLIZATION PROCESS

Sdobnyakov N.Yu.¹, Myasnichenko V.S.², Kolosov A.Yu.¹, Sokolov D.N.¹

¹Tver State University, Tver, Russia;

²Altai State Technical University n.a. I.I. Polzunov, Barnaul, Russia;
E-mail: nsdobnyakov@mail.ru

Методом Монте-Карло проведено моделирование структурных характеристик при фазовом переходе плавление-кристаллизация для наночастиц кобальта. Взаимодействие между атомами описывалось многочастичным потенциалом Гупта.

Monte-Carlo simulation of the structural characteristics for cobalt nanoparticles during melting-crystallization phase transition was carried out. The interaction between atoms was described by many-body Gupta potential.

В рамках настоящей работы нами произведено исследование эволюции структурных характеристик нанокластеров кобальта в процессе плавления и кристаллизации. В целях реализации компьютерного эксперимента нами была разработана компьютерная программа, в основу работы которой был положен метод Монте-Карло [1]. Для описания взаимодействия между атомами в кластере использовался многочастичный потенциал Гупта, который хорошо зарекомендовал себя для описания металлических систем. Аналитическое выражение для него задаётся следующей формулой:

$$U = \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{j \neq i}^N A \exp \left(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) - \left[\sum_{j \neq i}^N \zeta^2 \exp \left(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) \right]^{1/2} \right\}. \quad (1)$$

Здесь r_{ij} - расстояние между атомами i и j в кластере, A - экспериментальное значение энергии когезии, r_0 - параметр кристаллической решётки, p и q - значения упругих постоянных кристаллической структуры при $T = 0$ К. Приведённые выше параметры определяют на основе экспериментальных данных для энергии когезии. Для кобальта нами были использованы следующие параметры $r_0 = 0,2497$ нм, $A = 0,095$ эВ, $p = 11,604$, $\zeta = 1,488$ эВ и $q = 2,286$ [2].

Очевидно, что возможно использование двух основных методов идентификации фазового перехода первого рода на основе проведения компьютерного эксперимента: 1) путем изучения поведения термодинамических характеристик (калорические кривые потенциальной части внутренней энергии, теплоемкость); 2) путем изучения поведения структурных характеристик (первое координационное число, доля атомов, отвечающая кристаллической структуре – ГЦК, ГПУ и т.д.). Второй способ в литературе встречается достаточно редко. В нашей работе для идентификации фазового перехода использовались температурные зависимости доли различных структур.

Согласно рис. 1 в нанокластере Co_{935} при плавлении происходит разрушение кристаллической ГЦК-решетки. Вблизи точки плавления, соответствующей данному размеру нанокластера, наблюдается появление незначительного количества атомов, отвечающих ГПУ и ОЦК структурам. При этом доля атомов с нераспознанной структурой резко возрастает, что также свидетельствует о начале плавления нанокластера и косвенно подтверждает концепцию

существования области «предплавления» [3].

Анализ температурной зависимости доли различных структур η показывает, что после прохождения области фазового перехода при охлаждении системы структура нанокластера восстанавливается лишь частично, а именно при охлаждении системы (см. рис. 1) наблюдается появление различных структур (ГПУ, ОЦК, икосаэдрическая решетка). Более наглядно структурные преобразования в нанокластерах обнаруживаются при визуальном исследовании.

На рис. 2 представлены мгновенные конфигурации атомов в процессе нагревания кластера при различных температурах. Видно, что при температуре 293 К нанокластер факторизуется на две части – внутренние атомы, представленные ГЦК структурой, и поверхностные, которые невозможно распознать. В процессе нагревания на внешнем слое нанокластера появляются атомы, соответствующие ГПУ и ОЦК структурам. При этом доля атомов, отвечающих ГЦК структуре, в окрестности фазового перехода $T_m \approx 1340$ К скачком падает до нуля. После фазового перехода доля атомов нераспознанных структур колеблется около 80%, что свидетельствует о переходе нанокластера в жидкое состояние.

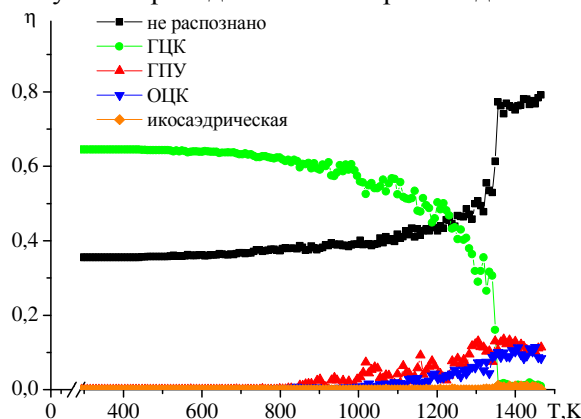


Рис. 1 - Температурная зависимость доли различных структур η в нанокластере Co_{935} в процессе нагревания

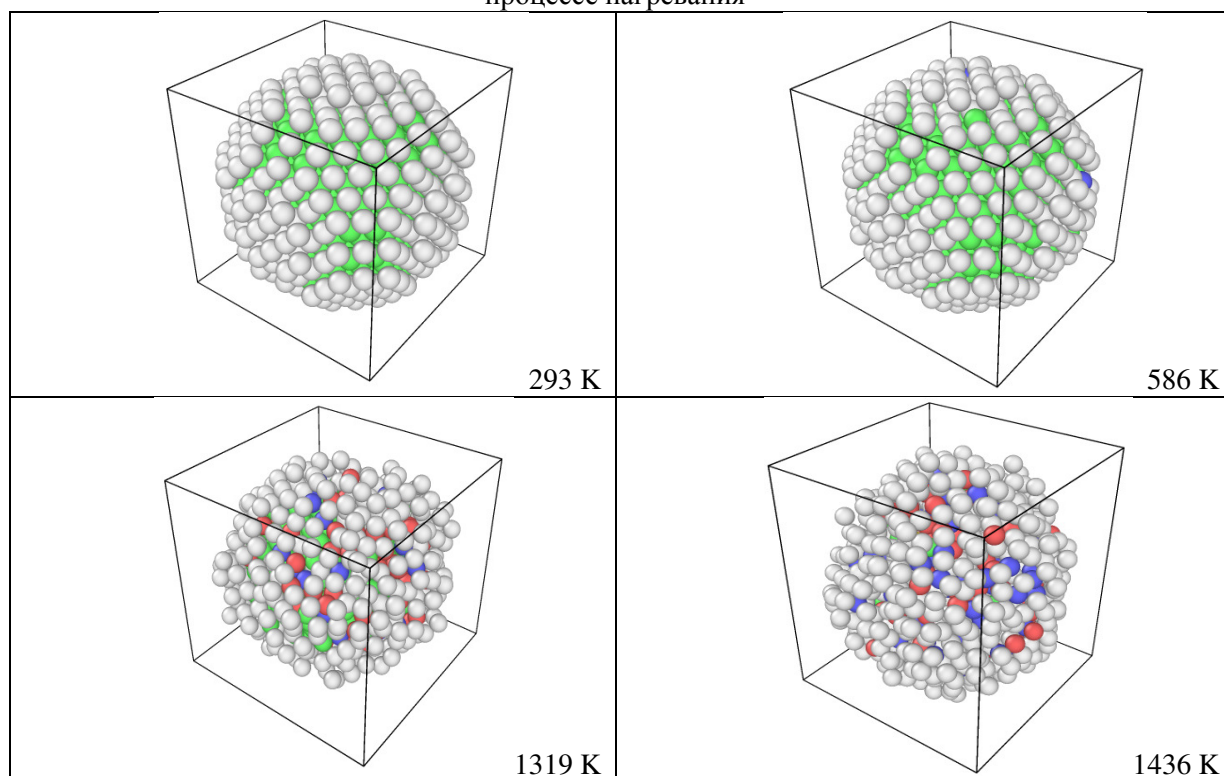


Рис. 2 - Структурная эволюция нанокластера Co_{935} в процессе нагревания: зелёные атомы – ГЦК, красные атомы – ГПУ, синие атомы – ОЦК, оранжевые атомы – икосаэдрическая структура, белые атомы – атомы нераспознанной структуры

На рис. 3 представлена температурная зависимость доли различных структур η в процессе охлаждения того же нанокластера. В окрестности температуры кристаллизации $T_c \approx 1055$ К происходит увеличение доли атомов, принадлежащих ГПУ и ГЦК структуре (до

примерно равного соотношения) и резкое снижение доли ОЦК-атомов. При этом слои ГЦК структуры и слои ГПУ структуры чередуются (см. рис. 4), что качественно согласуется с [4].

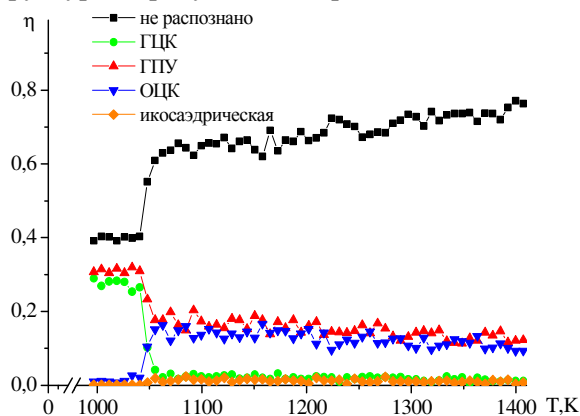


Рис. 3 - То же, что на рис. 1 в процессе охлаждения нанокластера Co_{935}

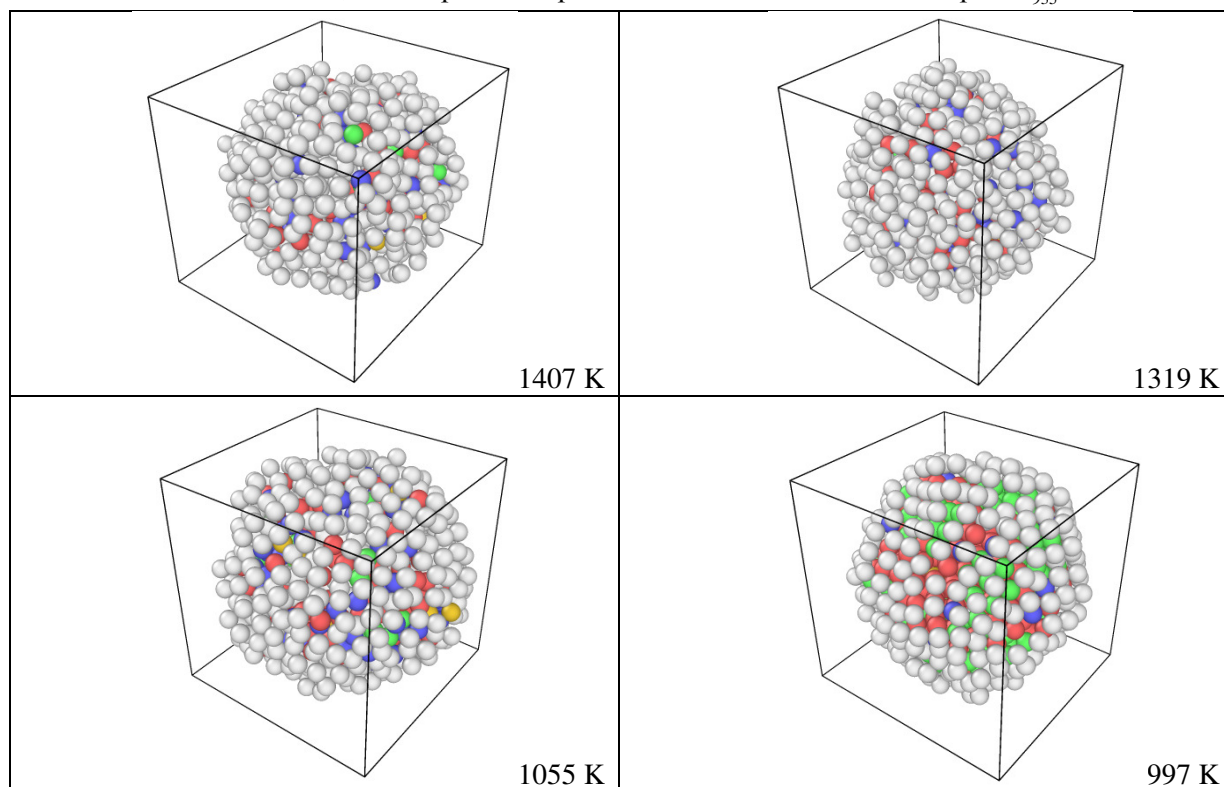


Рис. 4 - То же, что на рис. 2 в процессе охлаждения нанокластера Co_{935}

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 16-33-00742_мол_а) и при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения ГЗ в сфере научной деятельности (проект № 3.2448.2014/К).

Список использованных источников:

1. *Metropolis N. et al.* // Journal of Chemical Physics. 1953. V. 21. № 16. P. 1087.
2. *Gupta R.P.* // Physical Review B. 1981. V. 23. № 12. P. 6265.
3. *Сдобняков Н.Ю., Репчак С.В., Самсонов В.М., Базулев А.Н., Кульпин Д.А., Соколов Д.Н.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2011. № 5. С. 109.
4. *Perevezentsev V.N.* The theory of evolution of the microstructure of superplastic alloys and ceramics In book: Superplasticity. 60 years after Pearson / ed. N. Ridley. London: Bourne Press, 1995.