

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ЛИНЕЙНОГО РАСШИРЕНИЯ И СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ В ТИТАНСОДЕРЖАЩИХ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОКЛАСТЕРАХ

В.С. Мясниченко, Н.Ю. Сдобняков, П.М. Ершов, Е.М. Давыденкова, Ю.Н. Акимова

*Тверской государственный университет, 170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35,
E-mail: nsdobnyakov@mail.ru*

CONCERNING THE TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE LINEAR EXPANSION COEFFICIENT AND STRUCTURAL TRANSFORMATIONS IN TITANIUM-BASED BIMETALLIC NANOCCLUSERS

V.S. Myasnichenko, N.Yu. Sdobnyakov, P.M. Ershov, E.M. Davydenkova, Yu.N. Akimova

*Tver State University, 35 Sadoviy lane, Tver, 170002 Russia,
E-mail: nsdobnyakov@mail.ru*

Проведена серия молекулярно-динамических экспериментов по охлаждению разупорядоченных биметаллических кластеров на основе титана, с использованием потенциала сильной связи. Перекрестные параметры потенциала были рассчитаны с использованием правила Лоренца-Бертло. Получены температурные зависимости изменения состава внутренних атомов в нанокластерах и коэффициента линейного расширения. Анализ температурных зависимостей изменения состава показывает принципиально разные сценарии структурных превращений для нанокластеров TiAl и TiV.

A series of molecular dynamics experiments on cooling of disordered titanium-based bimetallic clusters using the tight-binding potential have been carried out. Cross potential parameters were calculated using the Lorentz-Berthelot rule. The temperature dependences of changes in the composition of internal atoms in nanoclusters and the coefficient of linear expansion are obtained. Analysis of the temperature dependences of changes in the composition shows fundamentally different scenarios of structural transformations for TiAl and TiV nanoclusters.

Данное исследование продолжает цикл работ, посвященных исследованию структурных превращений в титансодержащих биметаллических наночастицах. В [1] были проанализованы фазовые превращения в структуре наноразмерных биметаллических титансодержащих кластеров в процессе охлаждения. Полученные результаты прогнозируют преимущественно $\alpha + \beta$ кристаллическую структуру наносплава TiAl после охлаждения, в то время как наносплав TiV обладает аморфной структурой. Были также определены температуры стеклования для биметаллических систем Ti-Al и Ti-V для различных составов. Однако зависимость температуры стеклования от скорости охлаждения в [1] не рассматривалась. В [2] уже исследовались фазовые превращения в тернарном наносплаве Ti₆Al₄V. Было установлено, что скорость охлаждения сильно влияет на структуру тройного титанового наносплава, также впервые была оценка температур аморфизации и кристаллизации наночастиц Ti₆Al₄V.

Целью данной работы является изучение особенностей структурных превращений в TiAl и TiV наночастицах эквиатомного состава с $N=500$, а также температурной зависимости коэффициента линейного расширения. Столь малый размер обусловлен тем, что именно для таких наночастиц размерные эффекты могут играть существенную роль в процессах плавления и кристаллизации [3]. Моделирование проводилось с использованием авторского программного обеспечения [4] методом молекулярной динамики. Начальная конфигурация была получена вырезанием блока ГЦК решетки со случайным расположением атомов (выравнивалось только распределение атомов обоих сортов по координационным числам) и выдержкой при 1000К в течение 40 пс. Уравнения движения интегрировались по времени с использованием алгоритма Верле в скоростной форме с шагом по времени 1 фс. Охлаждение проходило в температурном интервале от 900 К до 300 К со скоростью $0,25 \cdot 10^{12} \text{ К} \cdot \text{с}^{-1}$.

Аналитическое выражение потенциала сильной связи, используемого для определения этих значений, дается следующей формулой:

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

где r_{ij} – расстояние между атомами i и j в кластере, r_0 расстояние между ближайшими соседями, A, ζ, p, q – свободные параметры, подбираются по экспериментальным значениям энергии когезии, параметру решетки (с учетом ограничения на атомный объем) и независимых упругих постоянных в соответствующей кристаллической структуре при температуре $T = 0 \text{ К}$ [5, 6]. Перекрестные параметры были рассчитаны с использованием правила Лоренца-Бертло.

Для идентификации простых фаз: икосаэдрической (ИК), а также кристаллических ГЦК, ГПУ и ОЦК, - мы использовали метод сопоставления полиэдральных шаблонов. В программном пакете OVITO [7] данный модификатор называется Polyhedral template matching [8]. На рис. 1-2 представлены структурные превращения биметаллических нанокластеров $\text{Ti}_{250}\text{Al}_{250}$ и $\text{Ti}_{250}\text{V}_{250}$. Анализ представленных диаграмм позволяет выявить структурный фазовый переход при температурах 505 К и 485 К соответственно.

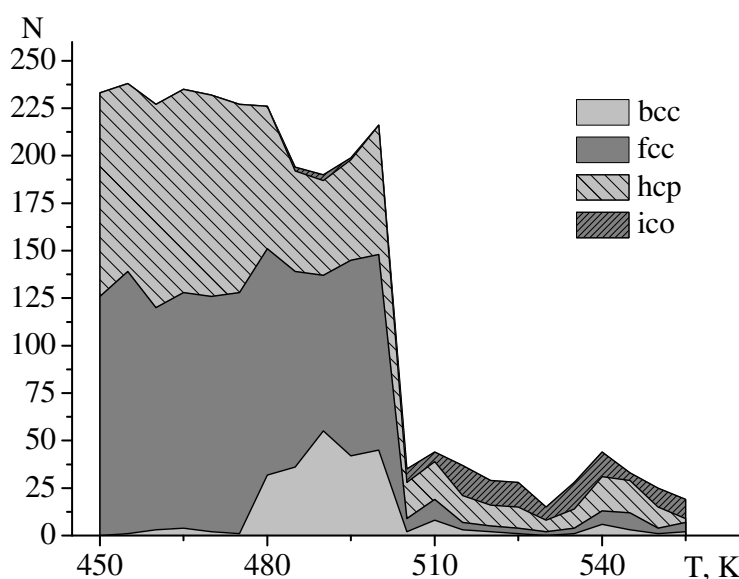


Рис. 1 - Структурные превращения в $\text{Ti}_{250}\text{Al}_{250}$ в процессе охлаждения: bcc – ОЦК, fcc – ГЦК, hcp – ГПУ фазы, ico – икосаэдрические квазикристаллы (порядок следования фаз снизу вверх)

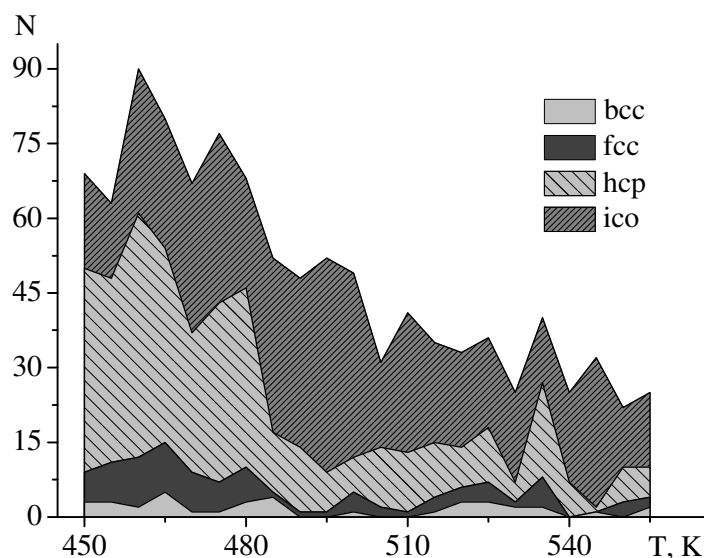


Рис. 2 - Структурные превращения в $Ti_{250}V_{250}$ в процессе охлаждения: bcc – ОЦК, fcc – ГЦК, hcp – ГПУ фазы, ico – икосаэдрические квазикристаллы (порядок следования фаз снизу вверх)

В целях оценки теплового воздействия и возможности использования биметаллических нанокластеров с малым числом частиц, в частности в качестве припоя или наноконтакта, а также составной части наноконпозиционных материалов нами были получены температурные зависимости коэффициента теплового расширения биметаллических нанокластеров $Ti_{250}Al_{250}$ и $Ti_{250}V_{250}$ (см. рис. 3). Видно, что температурная зависимость коэффициента теплового расширения носит немонотонный характер. Это связано с тем, что при малом числе атомов в нанокластере происходит достаточно интенсивная перестройка атомов как одного, так и другого сорта (эффект сегрегации). Для нанокластера $Ti_{250}Al_{250}$ в диапазоне 440-460 К наблюдается аномальное поведение, по-видимому, связанное с фазовым переходом жидкость – твёрдое тело, в первую очередь зарождением ОЦК фазы, доля которой начинает возрастать с 450 К.

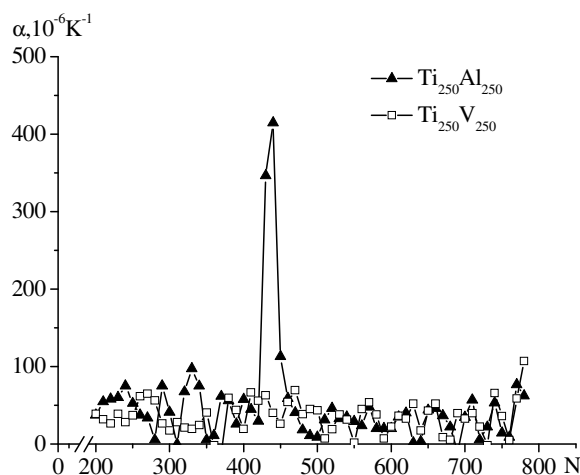


Рис. 3 - Температурная зависимость коэффициента теплового расширения для биметаллических нанокластеров $Ti_{250}Al_{250}$ и $Ti_{250}V_{250}$

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2020-0007) и Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 18-03-00132 и 20-37-70007).

Список использованных источников:

1. *Myasnichenko V.S., Sdobnyakov N.Yu., Ershov P.M., Sokolov D.N., Kolosov A.Yu., Davydenkova E.M.* // Journal of Nano Research. 2020. V. 61. P. 32-41.
2. *Sdobnyakov N.Yu., Myasnichenko V.S., Cheng-Hung San, Yu-Tsung Chiu, Ershov P.M., Ivanov V.A., Komarov P.V.* // Materials Chemistry and Physics. 2019. V. 238. Art. № 121895. 9 p.
3. *Sdobnyakov N.Yu., Sokolov D.N., Bazulev A.N., Samsonov V.M., Zikov T.Yu., Antonov A.S.* // Russian Metallurgy (Metally). 2013. № 2. P. 100-105.
4. Свидетельство № 2011615692 Российская Федерация. Молекулярнодинамическое моделирование и биоинспирированная оптимизация бинарных и тройных металлических наноструктур (КластерЭволюшн): свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ / *В.С. Мясниченко*; заявитель и правообладатель заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова». № 2011613732; заявл. 23.05.2011; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 20.06.2011. 1 с.
5. *Cleri F., Rosato V.* // Physical Review B. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.
6. *Karolewski M.A.* // Radiation Effects and Defects in Solids. 2001. V. 153. I. 3. P. 239-255.
7. *Stukowski A.* // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. V. 18. № 1. P. 015012-1-015012-7.
8. *Larsen P.M., Schmidt S., Schiøtz J.* // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2016. V. 24. № 5. P. 055007.