

УДК 538.911

ЗАВИСИМОСТЬ ПОЛНОЙ ЭНЕРГИИ ПРИМЕСНОГО АТОМА ВОДОРОДА ОТ ВЕЛИЧИНЫ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ РАСЧЕТНОЙ МОДЕЛИ

¹Зюзин Д.И., ²Маркидонов А.В.¹Научный руководитель: Старостенков М.Д., д.ф.-м.н, профессор¹Алтайский государственный технический университет им. И. И.

Ползунова

г.Барнаул

²Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского

государственного университета

г.Новокузнецк

Введение

Взаимодействие примесных атомов с металлами и сплавами, а также их поведение внутри материалов давно являются объектом исследований в материаловедении.

Водород, располагающийся внутри металла, сплава или на его поверхности определяется как примесный или внутренний водород. Он вводится в металлы и сплавы в процессе изготовления материала [1].

Водород, находясь в металлах и сплавах, оказывает большое влияние на их свойства, вызывая водородное охрупчивание. В процессе воздействия на металл механических напряжений, атомы водорода перемещаются по решетке, создавая локальные сгущения примеси. Данное поведение водорода способно создавать флуктуации физико-механических и химических характеристик металлов, приводя к определённой потере механических, антикоррозионных и др. свойств.

Процесс водородного охрупчивания связан с потерей пластичности металла и/или добавления ему хрупкости из-за внедрения в него водорода. Даже небольшое количество водорода способно привести к охрупчиванию металлов. Был предложен ряд механизмов для объяснения водородного охрупчивания различных материалов при различных условиях загрузки водорода [2,3]. В настоящий момент существует большое количество исследований, касающихся механизмов водородного охрупчивания, в том числе исследования на чистом никеле [6] и некоторых сталях [5,6].

В связи с тем, что из-за небольших значений энергии связи и энергии растворения, водород хоть и обладает высокой мобильностью в металлах и сплавах, такие свойства водорода усложняют экспериментальные исследования указанных свойств. Поэтому оптимальным способом исследования влияния и поведения водорода в системах металл-водород

является методы компьютерного моделирования, так как не нуждаются в больших материальных затратах. Настоящая работа посвящена исследованию с применением компьютерного моделирования и метода молекулярной динамики влияния упругой деформации кристаллической решетки ГЦК - интерметаллида Ni_3Al).

1. Описание модели

Как было указано ранее – в работе применялось компьютерное моделирование для моделирования необходимых процессов с помощью методов молекулярной динамики. Для этого применялось программное обеспечение XMD. За основу моделируемого эксперимента была выбрана расчетная ячейка в форме куба $10 \times 10 \times 10$ атомов (рисунок 1). Суммарное количество атомов ячейки составило 4000. Ячейка состояла из атомов никеля и атомов алюминия, в построенных координатах как полагается гранецентрированной кубической решетке. Граничные условия применялись периодические. Применялся потенциал EAM разработанный Майклом Баскесом.

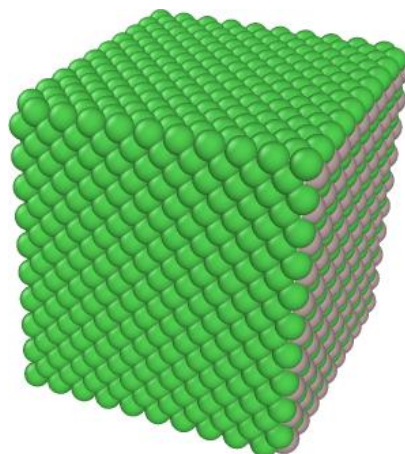


Рисунок 1 - Расчетная ячейка, применяемая в работе.

В моделировании потенциальная энергия i -го атома определяется так [8]:

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} p_\alpha(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \alpha_\beta(r_{ij}) \quad (1)$$

где r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами, F_α – функция парного потенциала, p_α – вклад в плотность заряда электронов от i -го атома в месте расположения j -го атома и α_β – это функция «погружения», которая представляет энергию, необходимую для помещения i -го атома типа α в электронное облако.

Указанный потенциал был выбран из-за удобства применения для ячеек с применением двух металлов, таких как Ni-Al, с внедрением туда примесного атома водорода. Были установлены следующие параметры ячейки: 3.787 Å, как среднее между значениями параметров ячейки для Ni и Al. Данный параметр идентичен для всех осей (x,y,z) создавая визуально правильную форму куба. Примесный атом водорода был расположен внутри октапоре и тетрапоре.

2. Результаты и обсуждение

Основная часть исследования - помещение примесного атома водорода в октаэдрическую и тетраэдрическую поры в ГЦК решетке (Рис. 2).

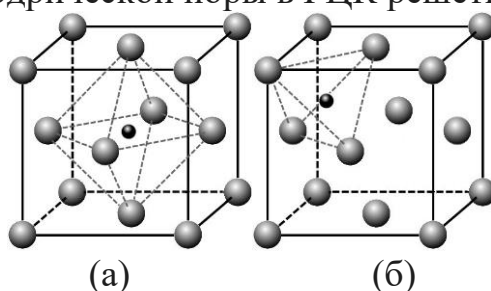


Рис. 2 Расположение примесного атома (выделен черным цветом) в октаэдрической (а) и тетраэдрической (б) порах в ГЦК решетке

После введения примесного атома в поры производилась деформация расчетной ячейки вдоль одной из осей. Конечным действием производилась динамическая релаксация с постепенным охлаждением до 0° К. Полученные результаты по деформации вдоль всех трех осей приведены в таблице 1 и на рисунке 3.

Таблица 1 - Энергия примесного атома в октаэдрической тетраэдрической порах при одноосной деформации

%	Деформация вдоль осей					
	Еполн, эВ					
	X		Y		Z	
	октапора	тетрапора	октапора	тетрапора	октапора	тетрапора
-3	13,0	14,1	13,0	14,2	12,7	14,1
-2	12,6	13,7	12,6	13,7	12,4	13,7
-1	12,2	13,3	12,2	13,3	12,1	13,3
0	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9
+1	11,5	11,8	11,5	11,8	5,9	11,8
+2	11,1	12,2	11,1	12,1	6,3	12,2
+3	10,8	12,5	10,8	12,5	11,1	12,5

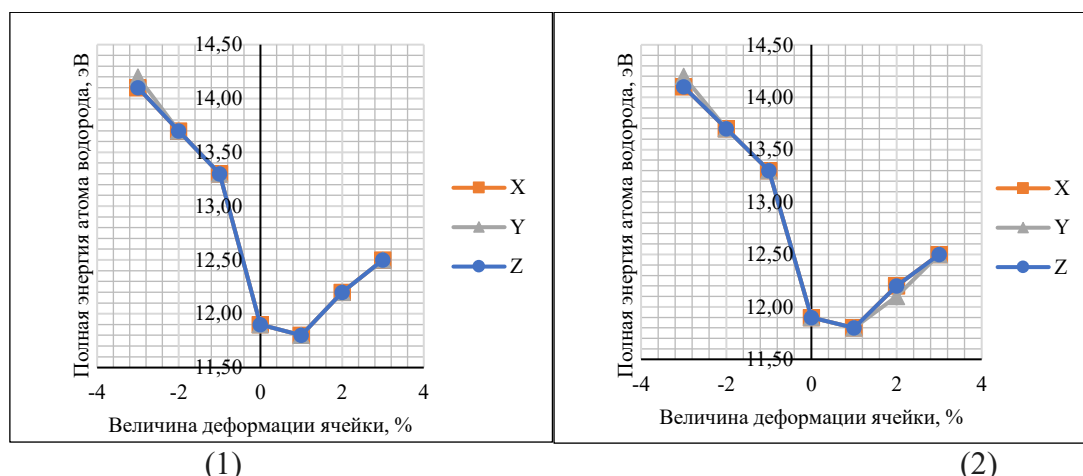


Рисунок 3 - График зависимости полной энергии примесного атома в октаэдрической (1) и тетраэдрической (2) порах от величины одноосной деформации расчетной ячейки

Упругая деформация расчетной ячейки задавалась с помощью изменения межатомных расстояний вдоль осей. Рассматриваемая, деформация варьировалась от сжатия (максимальная величина достигала -3%) до растяжения (максимальная величина деформации составляла +3%). В расчетной модели, применяемой в компьютерном моделировании, указанные величины деформаций не оказывали влияния на образование пластических сдвигов из-за применяемых периодических граничных условий и отсутствии дефектов и границ раздела. Так называемый идеальный кристалл не подвержен пластической деформации, в отличие от реальных металлов и сплавов.

Вторым этапом исследования было оценка влияния двухосной упругой деформации решетки при присутствии примесного атома. Результаты данных работ приведены в таблице 2 и на рисунке 4.

Таблица 2 - Энергия примесного атома в октаэдрической тетраэдрической порах при двухосной деформации

%	Деформация вдоль осей					
	Еполн, эВ					
	XY		XZ		YZ	
	октапора	тетрапора	октапора	тетрапора	октапора	тетрапора
-3	14,3	15,5	14,0	15,4	14,0	15,5
-2	13,4	14,6	13,2	14,5	13,2	14,6
-1	12,6	13,7	12,5	13,7	12,5	13,7
0	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9
+1	11,1	10,8	11,2	10,9	11,2	10,8
+2	10,5	11,4	10,6	11,5	10,6	11,5
+3	9,9	12,1	10,1	12,5	10,1	12,2

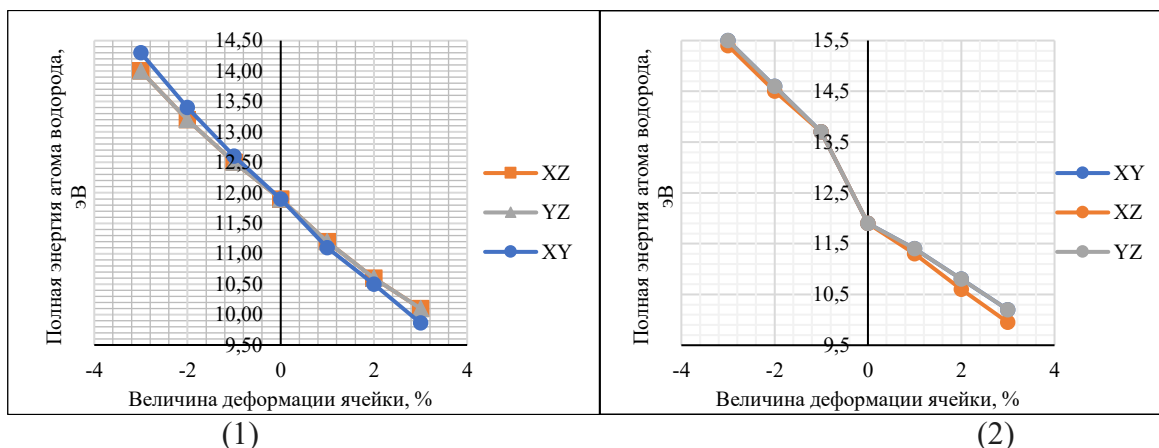


Рисунок 4 - График зависимости полной энергии примесного атома в октаэдрической (1) и тетраэдрической (2) пора от величины двухосной деформации расчетной ячейки

Согласно полученным результатам исследования, можно отметить, что увеличение энергии примесного атома водорода происходит при снижении величины сжатия и повышении величины удлинения расчетного образца. При оценке результатов влияния расположения примесного атома в тетраэдрической и октаэдрической порах заметны различия в получаемых

значениях полной энергии, как при одноосной деформации, так и при двухосной деформации.

3. Заключение

С применением метода молекулярной динамики проведено исследование влияния упругой деформации вдоль одной и двух осей на величину полной энергии примесного атома, располагающегося в тетраэдрической и октаэдрической порах. В качестве исследуемой расчетной модели (ячейки) выбран интерметаллид Ni_3Al , а примесным атомом был выбран водород (H), как примесный атом – причина водородного охрупчивания металлов и сплавов. Для рассматриваемой модели были произведены ряд экспериментов прикладывания упругой деформации в диапазоне от -3% (упругое сжатие) до +3% (упругое растяжение) вдоль одной и вдоль двух осей одновременно. Также два главных отличающихся факторов, оказывающих влияние на эксперимент, было расположение примесного атома - в тетраэдрической и октаэдрической порах. Полученные результаты показывают, как влияет величина и направление деформации на получаемую энергию атома, а также зависимость энергии от расположения атома внутри расчетной ячейки. Полученные результаты говорят только о характере изменения полной энергии в следствии изменения вида и величины деформации.

Список литературы

1. Umeda H., G. Itoh and Y. Kato: Effect of heat treatment condition on the hydrogen content in Al-4%Mg alloys J. JILM 56, 2006, Volume 56, Issue 4, Pages 203-209.
2. Nagumo, M. Function of hydrogen in embrittlement of high-strength steels / M. Nagumo // ISIJ International. – 2001. – Vol. 41, No. 6. – P. 590-598.
3. Neeraj T., Srinivasan R., Li J., Hydrogen embrittlement of ferritic steels: observations on deformation microstructure, nanoscale dimples and failure by nanovoiding, Acta Mater, 2012, V 60 p 5160-5171.
4. Martin M.L., Somerday B.P., Ritchie R.O., Sofronis P. and Robertson I.M. Hydrogen-induced intergranular failure in nickel revisited Acta Materialia, 2012, V 60, p 2739-2745
5. Martin M.L., Fenske J.A., Liu G.S., Sofronis P., Robertson I.M., On the formation and nature of quasi-cleavage fracture surfaces in hydrogen embrittled steels, Acta Mater, 2011, V 59.
6. Nagao A., Martin M.L., Dadfarnia M., Sofronis P., Robertson I.M. The effect of nanosized (Ti,Mo)C precipitates on hydrogen embrittlement of tempered lath martensitic steel. Acta Mater. 2014, V 74, p 244–254.
7. Atomistic Calculations of Hydrogen Interactions with Ni_3Al Grain Boundaries and $\text{Ni}/\text{Ni}_3\text{Al}$ Interfaces" Sandia Report SAND94-8741, January 1995 Created by Xianwei Sha, 08/19/97
8. [Pair - EAM](#), LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. [Архивировано](#) 27 мая 2010 года. Дата обращения: 22 мая 2010.
9. Зоря И. В. Энергия связи и миграции примесных атомов углерода, азота и кислорода в кристаллических решетках никеля, серебра и алюминия /

И. В. Зоря, Г. М. Полетаев, М. Д. Старостенков // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2019. – Т. 16, № 3. – С. 291-297. – DOI 10.25712/ASTU.1811-1416.2019.03.001. – EDN UHKKWM.

10. Зоря И. В. Влияние упругой деформации кристаллической решетки ГЦК металлов на энергию связи и миграции примесных атомов легких элементов / И. В. Зоря, Г. М. Полетаев // Химическая физика и мезоскопия. – 2019. – Т. 21, № 1. – С. 135-141. – DOI 10.15350/17270529.2019.1.17. – EDN MJQMBH.