УДК 538.911

Исследование зависимости полной энергии примесного атома водорода с помощью компьютерного моделирования

1 Д.И. Зюзин, 2 А.В. Маркидонов

1Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова, г. Барнаул, Россия

2Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, г. Новокузнецк, Россия

1denis.physic96@mail.ru

**Аннотация**

Компьютерное моделирование является отличным инструментом для реализации любых теорий, идей. В настоящее время на одном уровне с реальным экспериментом в физике конденсировано состояния ученые стали применять методы компьютерного моделирования. С применением метода молекулярной динамики, проведено исследование влияния величины упругой деформации вдоль одной и двух осей на энергию примесного атома водорода и его расположения внутри октапор и тетрапор. Получаемые данные отображают картину, при которой при увеличении величины сжатия происходит увеличение полной энергии примесного атома водорода, а в случае с растяжением – значение полной энергии уменьшается.

*Ключевые слова*: молекулярная динамика, компьютерное моделирование, полная энергия, упругая деформация.

**Введение**

В настоящее время большая часть производимых исследований в физике конденсированного состояния с применением методов компьютерного моделирования происходит с применением метода молекулярной динамики. Этот метод описывает эволюцию системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения. Большая часть молекулярно-динамических расчетов выполнены с использованием классической механики Ньютона. Впрочем, существуют работы, в которых этот метод комбинируется с решением уравнений квантовой механики Шредингера [1].

Среди всех возможных методов исследований – метод молекулярной динамики можно считать одним из самых мощных вычислительных и расчетных методов компьютерного моделирования, что позволяет эффективно применять его для большого количества процессов и систем. С помощью данного метода с высокой точностью в рамках заданной модели возможно учитывать и контролировать параметры анализируемого явления, исследовать процессы в динамике, протекающие на атомном уровне с помощью различных визуализаторов [2-4].

Метод молекулярной динамики способен вычислять траектории отдельных атомов или скоплений атомов, динамику взаимодействия различных частиц, в том числе в конденсированных средах на молекулярном уровне.

Основой метода молекулярной динамики являются материальные точки, ведь суть метода заключается в том, что временная эволюция системы взаимодействующих частиц отслеживается с помощью интегрирования уравнения их движения, что описывается в свою очередь законом Ньютона.

Вне зависимости от того, в что настоящее время существуют и успешно применяются в исследованиях методы электронной и атомно-силовой микроскопии, благодаря которой возможно исследовать атомную структуру веществ, ее динамику, метод компьютерного моделирования перекрывает многие задачи, неподвластные реальному эксперименту. В первую очередь это касается быстропротекающих процессов с выделением большого количества энергии и длительных по времени процессов.

Поэтому, стоит сказать, что весомая часть исследований производится с применением методов компьютерного моделирования, основываясь на методе молекулярной динамики. Метод молекулярной динамики может рассчитывать любые свойства системы:

1 Термодинамические – энергию, давление и энтропию.

2 Кинетические – коэффициенты диффузии, частоты колебаний атомов.

Стоит упомянуть, что идея, лежащая в основе любого подхода к молекулярному моделированию, проста: подготовить реалистичную молекулярную модель интересующей системы и дать ей развиваться с течением времени.

Если описать кратко суть метода молекулярной динамики, то он сводится к следующему:

1. Задаются исходные координаты частиц в соответствии с кристаллической структурой исследуемого вещества, его плотностью и температурой.

2. Рассчитывается движение некоторого числа частиц исследуемого вещества под действием прикладываемых сил.

3. Определяются макроскопические характеристики состояния вещества.

Настоящая работа нацелена на исследование влияния величины упругой деформации вдоль одной и двух осей на энергию примесного атома водорода и его расположения внутри октапор и тетрапор интерметаллида Ni3Al с помощью метода компьютерного моделирования

1. **Результаты и обсуждение**

Суть производимого исследования – анализ взаимодействия примесных атомов с металлами, а также их поведение внутри материалов, так как это 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 [5].

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. Важную роль подвижности водорода играет водородная хрупкость металлов. Водород не оказывает значительного влияния на предел прочности при растяжении, но предел прочности зависит от значения пластичности материала, который, в свою очередь значительно снижается при процессе наводороживания.

Процесс водородного охрупчивания связан с потерею пластичности металла и/или добавления ему хрупкости из-за внедрения в него водорода. Даже небольшое количество водорода способно привести к охрупчиванию металлов. [6,7]. В настоящий момент существует большое количество исследований, касающихся механизмов водородного охрупчивания, в том числе исследования на чистом никеле [8] и некоторых сталях [9].

Настоящая работа посвящена исследованию с применением компьютерного моделирования и метода молекулярной динамики влияния упругой деформации кристаллической решетки ГЦК - интерметаллида Ni3Al

В рассматриваемой экспериментальной ячейки воспроизводилось расположение примесного атома как в работах [10-12], где производилось исследование влияния различных величин упругой деформации ГЦК решетки при присутствии примесного атома.

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



(а) (б)

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 |

(1) (2)

Рисунок 3 - График зависимости полной энергии примесного атома в октаэдрической (1) и тетраэдрической (2) пора 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%).

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 |

(1) (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.

1. **Заключение**

Можно сделать выводы о нескольких преимуществах компьютерного моделирования над реальным экспериментом:

1. Проведение исследований и рассмотрения вопроса о возможном существовании новых материалов, которые в настоящем эксперименте сложно или невозможно получить.

2. Упрощает объяснение экспериментальных результатов. Благодаря моделированию возможно проводить оценку разных факторов и их сочетаний, после чего соотнести с теоретическими или экспериментальными данными

3. Моделирование материалов с необходимыми для эксперимента свойствами.

Поэтому, возможно сделать вывод, что компьютерное моделирование помогает проводить исследования существующих гипотез и разрабатывать новые теории.

С применением метода молекулярной динамики проведено исследование влияния упругой деформации вдоль одной и двух осей на величину полной энергии примесного атома водорода (H), располагающегося в тетраэдрической и октаэдрической порах интерметаллида Ni3Al.

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.

**Список литературы**

1. Малинецкий Г.Г, Курдюмов С.П. Новое в синергетике. Взгляд в третье тысячелетие / Г. Г. Малинецкий, С. П. Курдюмов. М. Наука 2002 -478 с
2. Bachurin, D. V. Atomistic simulation of the deformation of nanocrystalline palladium: The effect of voids / D. V. Bachurin, P. Численное моделирование Численное моделирование Gumbsch // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2014. – Vol. 22, No. 2. – P. 025011.
3. Molecular dynamics simulation of the effect of dislocations on the martensitic transformations in a two-dimensional model / S. V. Dmitriev, M. P. Kashchenko, Ju. A. Baimova [et al.] // Letters on Materials. – 2017. – Vol. 7, No. 4(28). – P. 442-446.
4. Murzaev R.T., Bachurin D.V., Nazarov A.A. Drift of dislocation triples under ultrasound inf luence // Ultrasonics. 2016. V. 64. P. 77–82.
5. 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.
6. Nagumo, M. Function of hydrogen in embrittlement of high-strength steels / M. Nagumo // ISIJ International. – 2001. – Vol. 41, No. 6. – P. 590-598.
7. 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.

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

1. 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.

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.

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.

Емелин Д. А. Молекулярно-динамическое моделирование влияния двухосных деформаций на растворимость водорода в ОЦК-железе с использованием ЕАМ-потенциалов / Д. А. Емелин, А. А. Мирзоев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Металлургия. – 2016. – Т. 16, № 2. – С. 40-45. – DOI 10.14529/met160206. – EDN WBOWHX.

Investigation of the dependence of the total energy of an impurity hydrogen atom using computer modeling

1 D.I. Zyuzin, 2 A.V. Markidonov,

1Altai State Technical University named after I. I. Polzunov, Barnaul, Russia

2Kuzbassky Humanitarian Pedagogical Institute of Kemerovo State University, Novokuznetsk, Russia

1denis.physic96@mail.ru

Abstract

Computer modeling is an excellent tool for the implementation of any theories and ideas. Currently, at the same level as a real experiment in condensed matter physics, scientists have begun to apply computer modeling methods. Using the method of molecular dynamics, the influence of the magnitude of elastic deformation along one and two axes on the energy of an impurity hydrogen atom and its location inside octapores and tetrapores was studied. The obtained data show a picture in which, with an increase in the amount of compression, the total energy of the adjacent hydrogen atom increases, and in the case of stretching– the value of the total energy decreases..