

### Література

1. Schobel J.D., Stadelmaier H., Metallurgy. – 1965. – №7. – P. 715–719.
2. Лякишев Н. П. Диаграммы состояния двойных металлических систем : в 3 т. – Т. 3, Кн. 1. / Н. П. Лякишев – М. : Машиностроение, 2001. – 972 с.
3. Лякишев Н.П. Диаграммы состояния двойных металлических систем : в 3 т. – Т. 1. / Н. П. Лякишев – М. : Машиностроение, 1996. – 992 с.
4. Lugscheider E., Reimann H., Pankert R. Mit 4a- und 5a-Metallen stabilisierte  $\tau$ -Boride des Nickel / E. Lugscheider, H. Reimann, R. Pankert // Metall. – 1982. – №36. – P. 247–251.
5. Ajao, J.A. Phase transitions in some nickel-rich nickel – boron – titanium hard alloys / J.A. Ajao, // J. Alloys Compds. – 2010. – 493. – P. 314–321.

Надійшла 30.06.15

УДК 544.272

С. О. Лисовенко

*Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України, м. Київ*

### ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ БОРУ НА СТРУКТУРУ РОЗПЛАВУ СИСТЕМИ Ni-B-C МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

*Проведено моделювання розплавів системи Ni-B-C за методом Кар-Парітелло. Встановлено, що зі збільшенням концентрації бору в розплаві зменшується рухливість атомів. Зменшення рухливості атомів розплаву має наслідком збільшення в'язкості розплаву. Отримані моделі розплавів системи Ni-B-C проаналізовано методом Вороного-Делоне. У результаті аналізу розподілу коефіцієнтів сферичності поліедрів Вороного, побудованих навколо атомів Ni та C встановлено, що при додаванні B зменшується однорідність пакування в околі атомів Ni та розуцілюється пакування атомів навколо C.*

**Ключові слова:** метод Вороного-Делоне, метод Кар-Парітелло, система Ni-B-C.

Розплави перехідних металів з вуглецем широко використовують як ростові середовища для вирощування алмазів. Вони не лише добре змочують і розчиняють вуглець, а й мають оптимальні  $p, T$ -умови утворення кристалів. Знаючи локальний порядок у металевому розплаві з вуглецем, можна отримати цінну інформацію про характер його взаємодії з компонентами металеві матриці, що дозволяє вивчення та пояснення фізико-хімічних властивостей досліджуваної системи, формулювання рекомендацій щодо оптимізації умов вирощування алмазу.

Молекулярна динаміка (МД) – ефективний метод вивчення локального порядку в рідині [1]. Якщо рідину потрібно вивчати за високого тиску, доцільніше використовувати ab initio — МД (або метод Кар-Парітелло) [2], ніж класичну МД. За методом Кар-Парітелло сили, що діють на частинки, розраховують способами квантової механіки, тому розрахунок одного кроку еволюції моделі потребує значно більше розрахунків, ніж у класичній МД. Це призводить до того, що отримані моделі значно обмежені за розмірами та в часом еволюції.

В роботі оцінювали методом Кар-Парітелло рухливість атомів у розплавах системи Ni-B-C. Отримані моделі аналізували з методом Вороного-Делоне. У результаті аналізу розподілу коефіцієнтів сферичності поліедрів Вороного (ПВ), побудованих навколо атомів Ni та C виявили, що при додаванні B пакування атомів навколо C розуцілюється за одночасного зменшення однорідності пакування в околі атомів Ni.

Для моделювання використовували програмний пакет abinit [3]. Моделювання здійснювали в кубічній елементарній комірці. За температури 1775 К довжина ребра комірки становила 1,13 нм, сумарна кількість атомів – 108 (куб з ГЦК-комірок з ребром 3). Для розрахунків використовували обчислювальний комплекс СКІТ Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України [4].

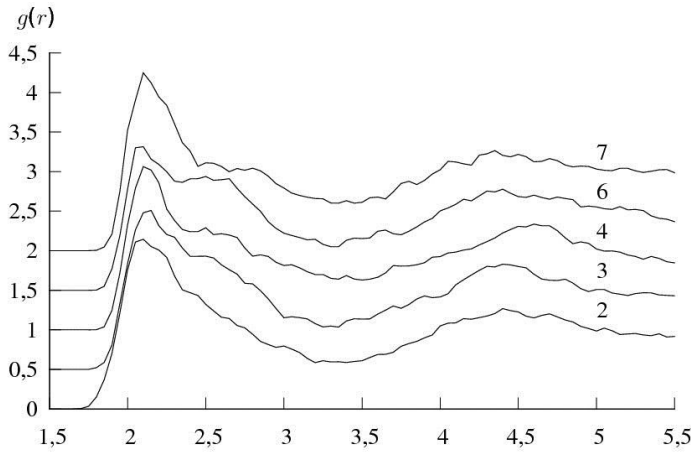


Рис. 1 Парні кореляційні функції нікелю в моделях з різною кількістю атомів бору. Криві отримані з усередненням по часу 600 кроків моделювання (1нс)

Як чітко випливає з функцій парного розподілу ( $g(r)$ ) нікелю (рис. 1), з додаванням бору до системи взаємне розміщення атомів Ni істотно змінюється. Зі збільшенням кількості атомів бору змінюється форма першого максимуму кривої  $g(r)$ , що свідчить про суттєві зміни в першій координаційній сфері Ni.

Коефіцієнт самодифузії в молекулярно-динамічних моделях визначається за кутом нахилу графіка залежності середньоквадратичного зміщення атомів від часу [1]. В даному випадку, оскільки будували моделі малого розміру і моделювали порівняно невеликий час — такий графік дозволяє лише оцінити зміну швидкості самодифузії зі зміною

параметрів моделювання. Згідно з рис. 2,а – відбувається чітка тенденція до зменшення рухливості атомів вуглецю за збільшення концентрації бору. Знижується також рухливість атомів нікелю (рис.2, б). Оскільки нікель є металевою матрицею в цій системі, зниження рухливості його атомів має наслідком збільшення в'язкості розплаву.

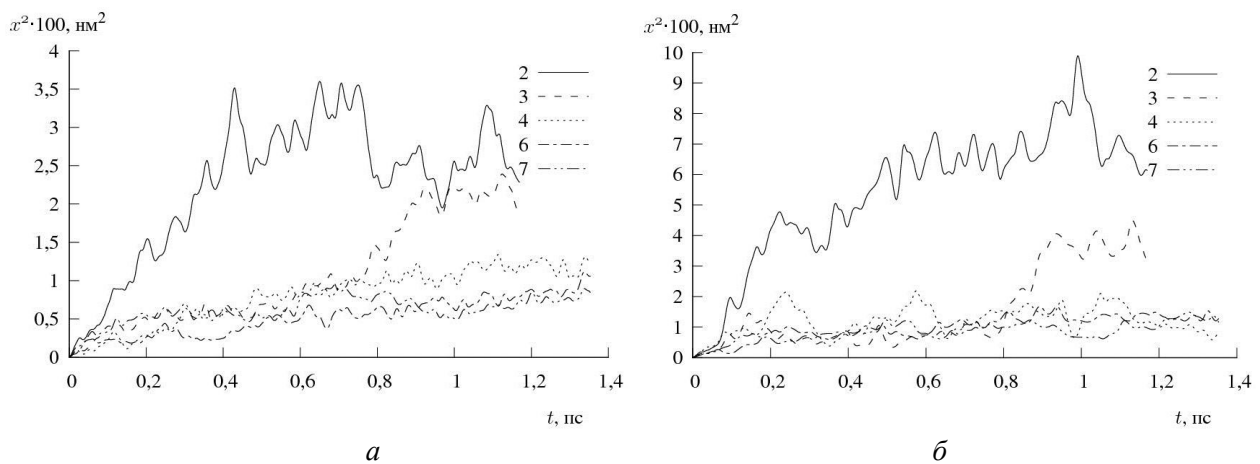


Рис. 2. Середньоквадратичне зміщення атомів вуглецю (а) та нікелю (б) в комітках з різним вмістом бору. Числа біля кривих вказують на кількість атомів бору в модельній комірці (загальна кількість атомів усіх типів в комірці складає 108)

Для полієдрів Вороного, побудованих навколо атомів рідини або аморфного тіла, характерна наявність п'ятикутних граней [5]. У розглянутому випадку кількість п'ятикутних граней зменшується зі збільшенням вмісту бору, тоді як кількість чотири та шести-кутних граней збільшується (рис. 3). При цьому зауважимо, що ПВ, побудований навколо атома ОЦК ґратки, складається з шести чотирикутних та восьми шести-кутних граней. Таким чином, проаналізувавши форму ПВ, виявили

збільшення структурного мотиву ОЦК гратки серед атомів Ni зі збільшенням кількості атомів В в системі.

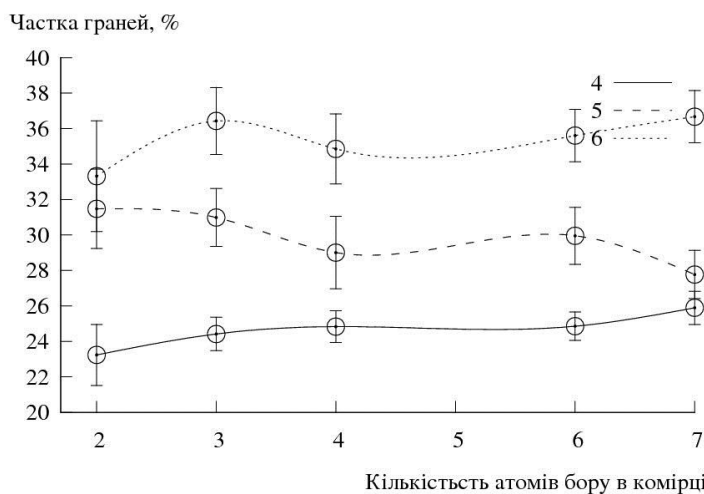


Рис. 3. Залежності частки чотири, п'яти та шестигранних граней поліедрів Вороного, побудованих навколо атомів Ni, від кількості атомів бору в комірці

Проведено моделювання системи Ni-B-C методом Кар-Паринелло. Установлено, що при збільшенні концентрації бору в расплаве зменшується подвижність атомів. Зменшення подвижності атомів приводить до збільшення в'язкості расплава. Отримані моделі расплава проаналізовані з використанням методу Вороного-Делонэ. Аналіз розподілу коефіцієнтів сферичності поліедрів Вороного побудованих навколо атомів Ni і С показав, що при додаванні В упаковка атомів навколо С робиться менш щільною і зменшується однорідність упаковки навколо атомів Ni.

**Ключевые слова:** метод Вороного-Делоне, метод Кар-Паринелло, система Ni-B-C

Car-Parrinello modeling of the Ni-B-C system alloys was provided. It was established that with increasing boron concentration moveability of alloys atoms. Reducing of atoms moveability involves viscosity increasing. Obtained models was analyzed by Voronoi-Delaune method. By sphericity coefficients distribution analysis of polyhedrons builded around Ni and C atoms it was shown that with addition B into the system atoms packing around C decreases its density so about packing uniformity around Ni atoms.

**Key words:** method Voronoi-Delaunay method Kar-Parinello system Ni-B-C

### Література

1. Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ / Д. К. Белашенко М.: МИСИС, 2005. – 406 с.
2. Mitrokhin Y. Comparison of simulations of liquid metals by classical and ab initio molecular dynamics // Comp. Mat. Sci. – 2006. – V. 36. – P. 189–193.
3. ABINIT: First-principles approach to material and nanosystem properties / X. Gonze, B. Amadon, P.M. Anglade et al. // Computer Physics Communications. – 2009. – V. 180, N 12. – P. 2582–2615.
4. Суперкомпьютерные кластерные системы – организация вычислительного процесса / В. Н. Коваль, С. Г. Рябчун, И. В. Сергиенко, А. А. Якуба // Проблемы програмування. – 2006. – N 2–3. – С. 197–210.
5. Наберухин Ю. И. Структурные модели жидкостей / Ю.И. Наберухин – Новосибирск: НГУ. – 1981. – 83 с.

Надійшла 09.06.15