

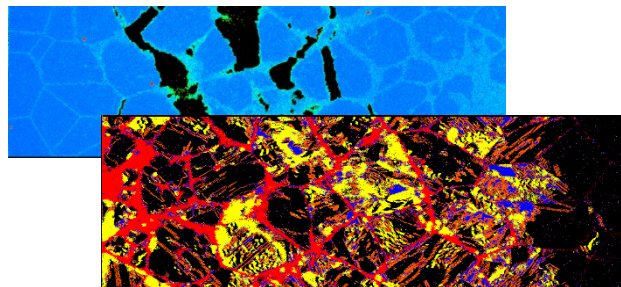
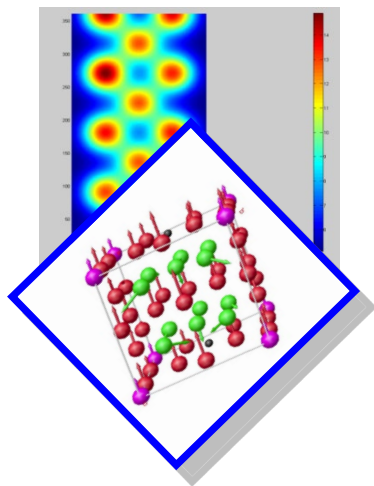


РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Компьютерное моделирование свойств материалов

Дремов В.В.

РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина





Введение. Суперкомпьютерные технологии в материаловедении

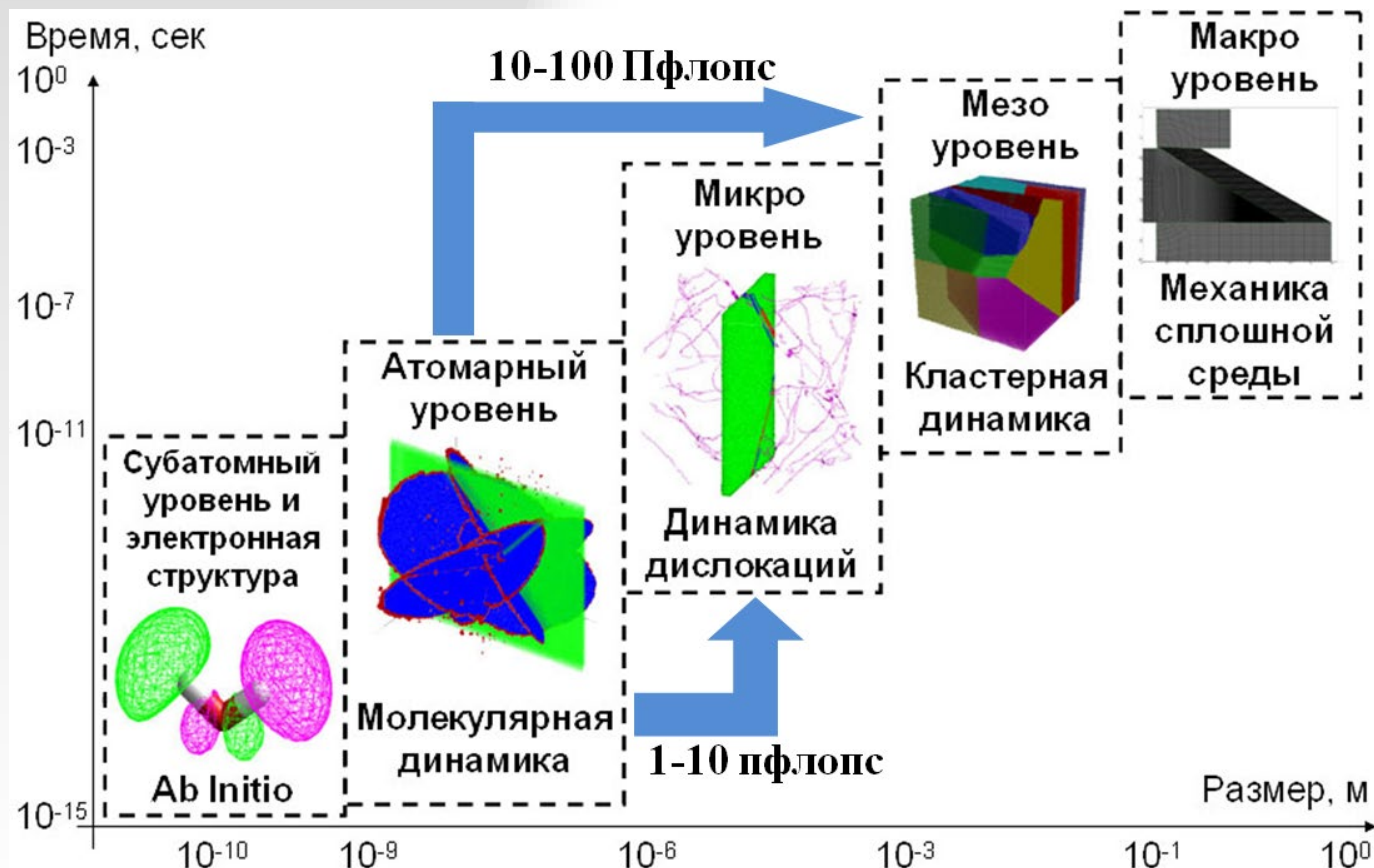
Материаловедение - наука экспериментальная и моделированию в ней традиционно отводилась вспомогательная роль,

НО

современные суперкомпьютеры позволяют проводить виртуальный эксперимент максимально приближенный к реальному и, таким образом, адресовать решение по крайней мере некоторых материаловедческих проблем именно моделированию:

- **предсказание свойств и поведения материалов в условиях недостижимых в лабораторных экспериментах**
- **предсказание свойств и поведения материалов в условиях хранения и/или эксплуатации, охватывающих длительные промежутки времени**

Иерархия моделей материалов

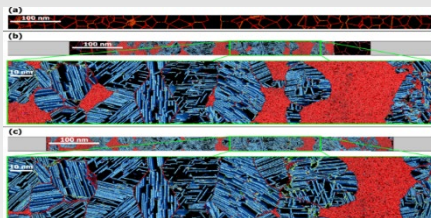
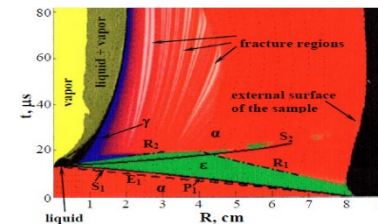


Приложения моделей



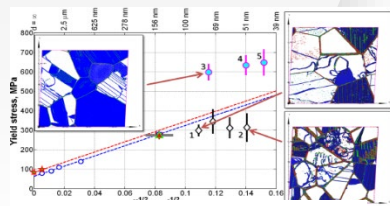
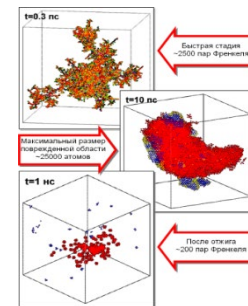
РФЯЦ-ВНИИФ
РОСАТОМ

Уравнения состояния в условиях высокой концентрации энергии



Реология и кинетика фазовых превращений при высоких скоростях деформации

Радиационная стойкость конструкционных материалов и радиационное старение ядерно-активных материалов

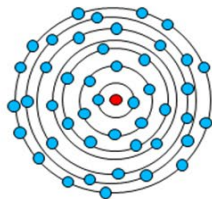


Механические и теплофизические свойства наноструктурированных материалов

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

Первопринципное моделирование на основе DFT

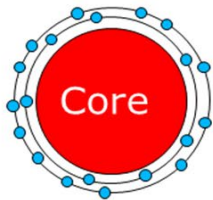
Exciting (FP)



VASP (PP)

QE (PP)

AbInit (PP)



$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i}$$

Моделирование методом классической МД

МОЛОХ (разработка РФЯЦ-ВНИИТФ)

LAMMPS (SNL+)

Атомистическое моделирование



Первопринципное моделирование на основе DFT

Размер моделируемой системы

< 1000 атомов

Рассчитываемые свойства

Свойства материала

- Уравнение состояния
- Фононные спектры
- Фазовая стабильность
- Диффузия
- Вязкость
- Характеристики дефектов
-

Моделирование методом классической МД

Размер моделируемой системы

$\sim 10^9$ атомов (EAM)

$\sim 10^8$ атомов (MEAM/GEAM)

$\sim 10^7$ атомов (SNAP)

Рассчитываемые свойства

- Прочностные свойства
- Кинетика фазовых превращений
- Перекристаллизация
- Радиационная стойкость
- ...

Процессы

Метод классической молекулярной динамики и используемые модели взаимодействия

С точки зрения математики метод молекулярной динамики представляет собой задачу Коши для системы $3N$ линейных дифференциальных уравнений второго порядка (уравнения движения Ньютона):

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad i=1, \dots, N$$

где m – масса i -го атома, r – радиус-вектор i -го атома, U – потенциальная энергия системы частиц, N – число частиц.

Метод классической молекулярной динамики и используемые модели взаимодействия

С точки зрения математики метод молекулярной динамики представляет собой задачу Коши для системы $3N$ линейных дифференциальных уравнений второго порядка (уравнения движения Ньютона):

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad i=1, \dots, N$$

где m – масса i -го атома, r – радиус-вектор i -го атома, U – потенциальная энергия системы частиц, N – число частиц.

$N \sim 10^9$

Метод классической молекулярной динамики и используемые модели взаимодействия



Модель погруженного атома (Дау & Баскес, 1987)

$$H = K + V = K + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_i^N F(\rho_i)$$

$$\rho_i = \sum_j^N \rho^0(r_{ij})$$

- полная электронная плотность в точке расположения i -го атома

$$\rho^0(r_{ij})$$

- сферически-симметричная функция, описывающая электронную плотность, создаваемую вокруг себя одним атомом

Область применения – простые металлы с высокосимметричными решетками (ГЦК, ОЦК, ГПУ) и их соединения

Метод классической молекулярной динамики и используемые модели взаимодействия

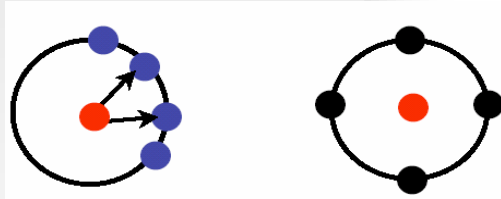


Модифицированная Модель Погруженного Атома (Дау & Баскес, 1992)

$$F(\bar{\rho}_i) = AE_c \frac{\bar{\rho}_i}{\rho_{0i}} \ln \frac{\bar{\rho}_i}{\rho_{0i}}$$

$$\bar{\rho}_i = \rho_i^{(0)} \frac{2}{1 + \exp(-\Gamma)}$$

$$\Gamma_i = \sum_{l=1}^3 t^{(l)} \left(\rho_i^{(l)} / \rho_i^{(0)} \right)^2$$



Парциальные электронные плотности эффективно соответствуют s-, p-, d-, и f- орбиталям

$$\left(\rho_i^{(l)} \right)^2 = \frac{\sum_j t_j^{(l)} \rho_j^{a(l)}(r_{ij}) \sum_k t_k^{(l)} \rho_k^{a(l)}(r_{ik}) P_l(\cos(\theta_{ijk}))}{\sum_j \left(t_j^{(l)} \right)^2 \rho_j^{0(l)}(r_{ij})}$$

$$\rho_i^{(0)} \Big|_i = \sum_{j \neq i} \rho_j^{a(0)}(r_{ij}),$$



$$\left(\rho^{(1)} \right)^2 \Big|_i = \sum_{\alpha} \left[\sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^{\alpha}}{r_{ij}} \rho_j^{a(1)}(r_{ij}) \right]^2,$$

$$\left(\rho^{(2)} \right)^2 \Big|_i = \sum_{\alpha, \beta} \left[\sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^{\alpha} r_{ij}^{\beta}}{r_{ij}^2} \rho_j^{a(2)}(r_{ij}) \right]^2 - \frac{1}{3} \left[\sum_{j \neq i} \rho_j^{a(2)}(r_{ij}) \right]^2,$$

$$\left(\rho^{(3)} \right)^2 \Big|_i = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \left[\sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^{\alpha} r_{ij}^{\beta} r_{ij}^{\gamma}}{r_{ij}^3} \rho_j^{a(3)}(r_{ij}) \right]^2 - \frac{3}{5} \sum_{\alpha} \left[\sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^{\alpha}}{r_{ij}} \rho_j^{a(3)}(r_{ij}) \right]^2$$

Область применения ММПА – металлы со сложной электронной структурой и их соединения (U, δ-Pu, Ga и др.)

Метод классической молекулярной динамики и используемые модели взаимодействия



Обобщенная Модель Погруженного Атома (ОМПА) (Ионов, Сапожников, Дремов, 2013*)

ММПА

$$\Gamma_i = \sum_{l=1}^3 t^{(l)} \left(\rho_i^{(l)} / \rho_i^{(0)} \right)^2 \quad \left(\rho_i^{(l)} \right)^2 = \frac{\sum_j t_j^{(l)} \rho_j^{a(l)}(r_{ij}) \sum_k t_k^{(l)} \rho_k^{a(l)}(r_{ik}) P_l(\cos(\theta_{ijk}))}{\sum_j \left(t_j^{(l)} \right)^2 \rho_j^{0(l)}(r_{ij})}$$



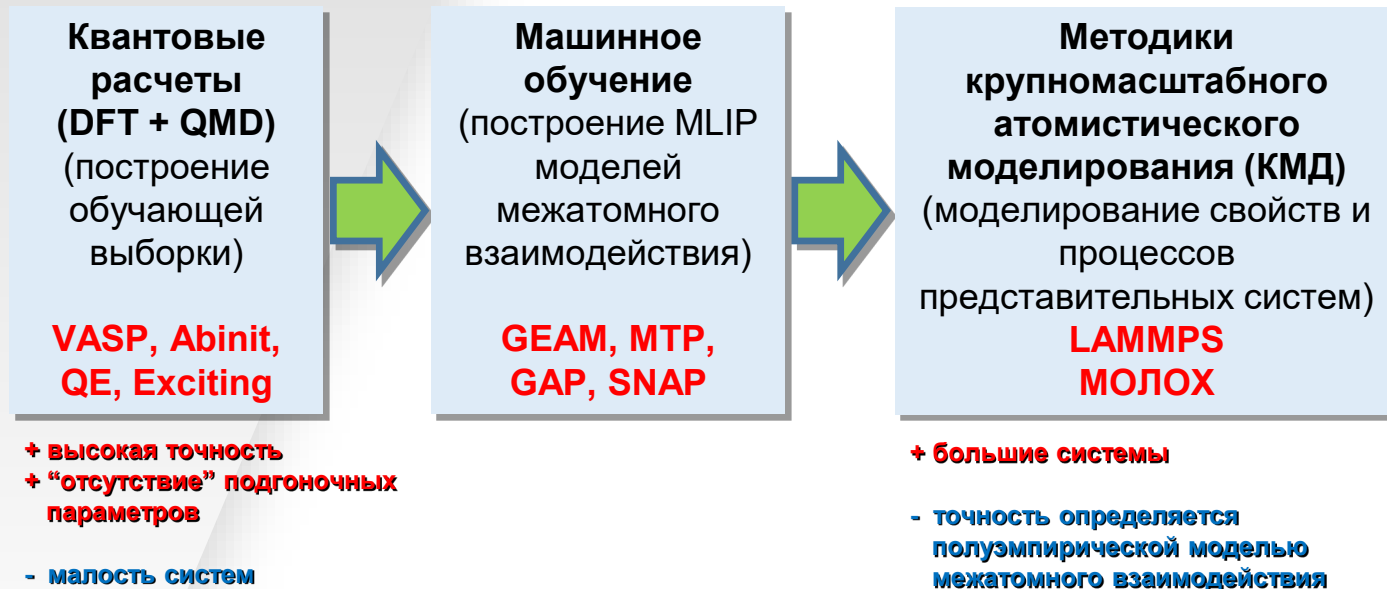
ОМПА

$$\Gamma_i = \sum_{k=0}^K \sum_{m=0}^M \tau_{t_i}^{(k,m)} M_{(k)i}^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m} \delta_{\alpha_1 \beta_1} \delta_{\alpha_2 \beta_2} \dots \delta_{\alpha_m \beta_m} M_{(k)i}^{\beta_1 \beta_2 \dots \beta_m} \quad M_{(k)i}^{(m)} = \sum_{j \neq i} \Xi_{ij} \Psi_{(k)ij}^{(m)}$$

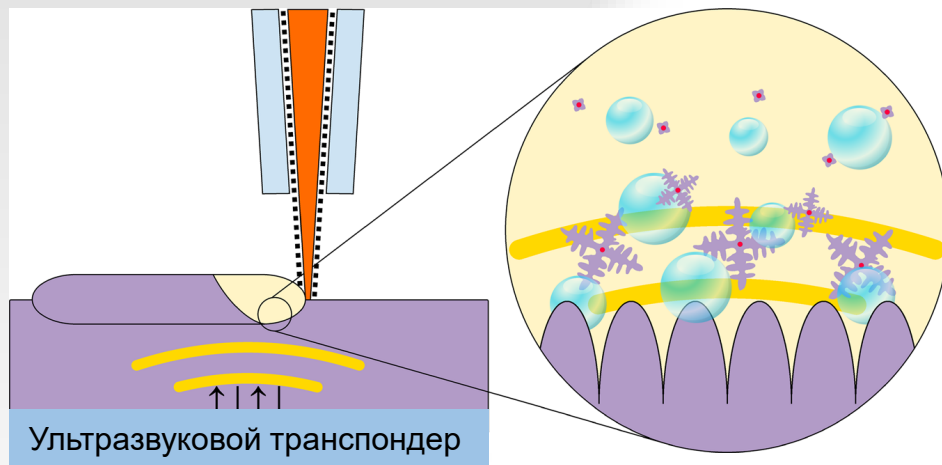
$$\Psi_{(k)ij}^{(m)} = \Psi_{(k)ij}^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m} e_{ij}^{\alpha_1} e_{ij}^{\alpha_2} \dots e_{ij}^{\alpha_m} \frac{\rho_j^{(k)}(r_{ij})}{\bar{\rho}_i^0}$$

Область применения ОМПА – металлы со сложными решетками и их соединения

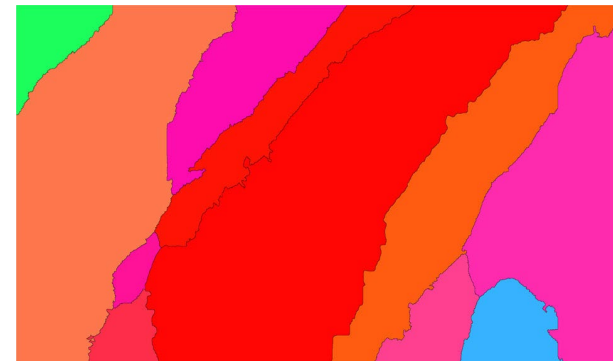
* G.V. Ionov, F.A. Sapozhnikov, V.V. Dremov, M.A. Zocher, D.L. Preston, J. Nucl. Mater., 435,10-16, (2013).



Развитие аддитивных технологий как мотивация данного исследования

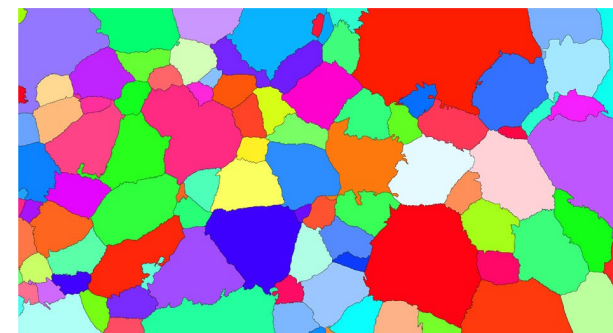


Без УЗ

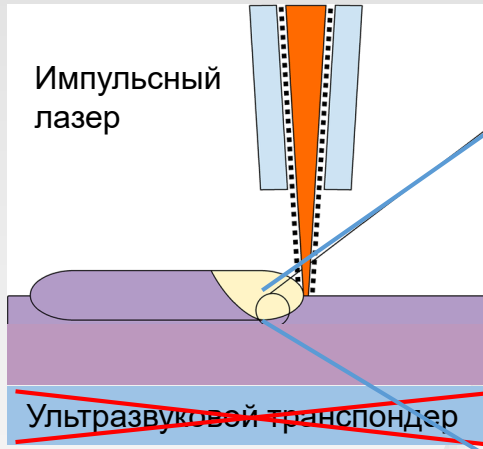


Сплав Ti-6Al-4V

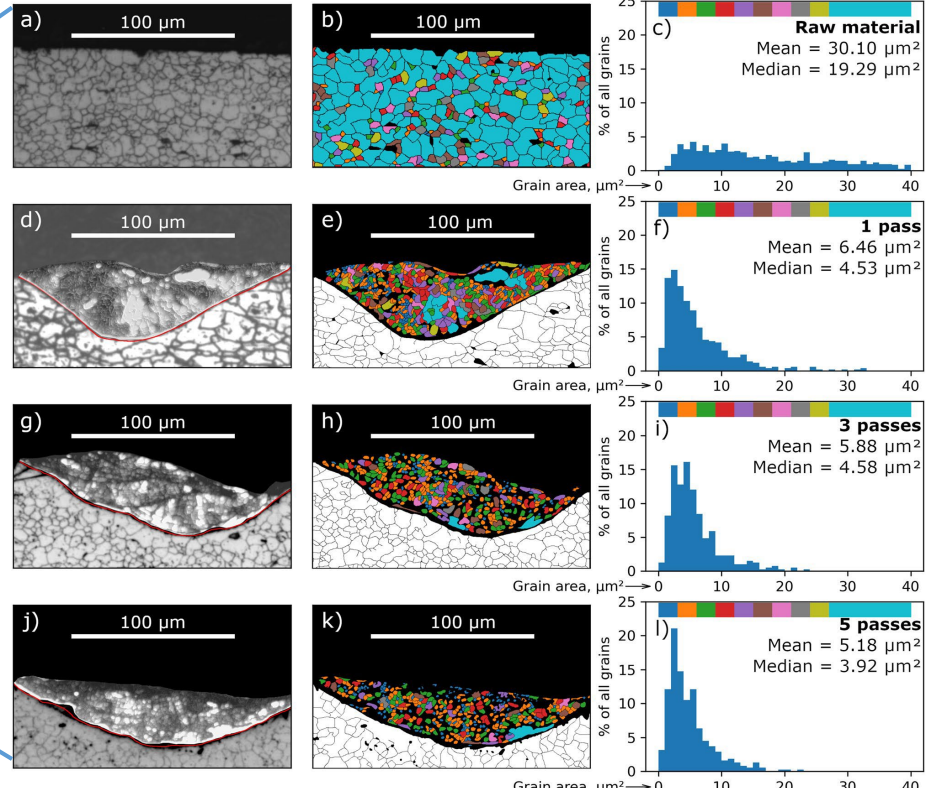
С УЗ



Развитие аддитивных технологий как мотивация данного исследования



Сталь 316L



Атомистическая модель и использованные коды

Состав : **Fe-14Ni-19.5Cr**

Потенциал : **EAM** NIST Interatomic Potentials Repository,
<https://www.ctcms.nist.gov/potentials/entry/2019-Mendelev-M-I-Fe-Ni-Cr/2019-Mendelev-M-I-Fe-Ni-Cr-LAMMPS-ipr1.html>.

МД код : **LAMMPS**

Учет электронной теплопроводности : **двух-температурная модель***

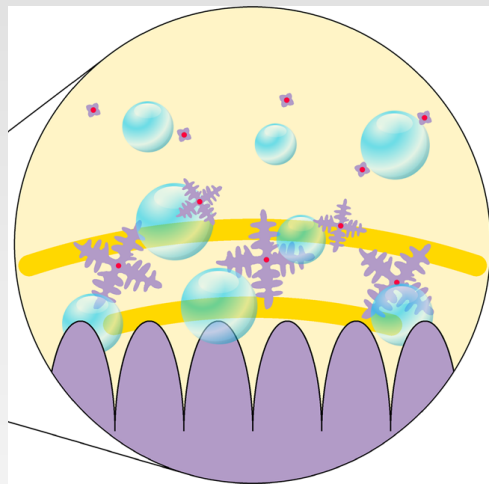
Распознавание и визуализация : **OVITO-РТМ, АТА (Adaptive Template Analysis*)**

Свойства	Эксперимент для 316L	EAM
$T_{пл}$, К	1689	1762
$\Delta H_{пл}$, кДж/кг	254	287
$\Delta V_{пл}$, Å ³ /атом	0.36	0.678
$\rho_{пл}^{ГЦК}$, кг/м ³	7112	7554
$\rho_{пл}^{жидк}$, кг/м ³	6920	7157
γ_{SF} , мДж/м ²	20	130

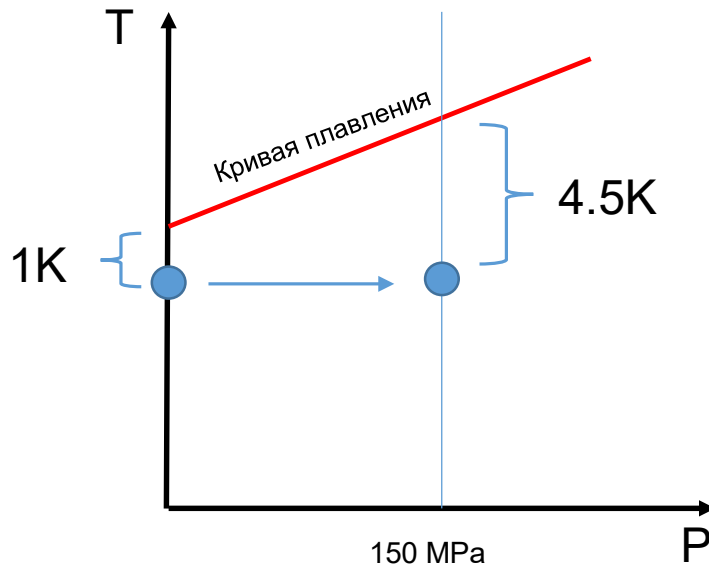
* J. Phys.:
Cond. Matter 19 (2007)
496201.

** Russian J. of Phys.
Chem. B 2 (2008) 238
– 245.

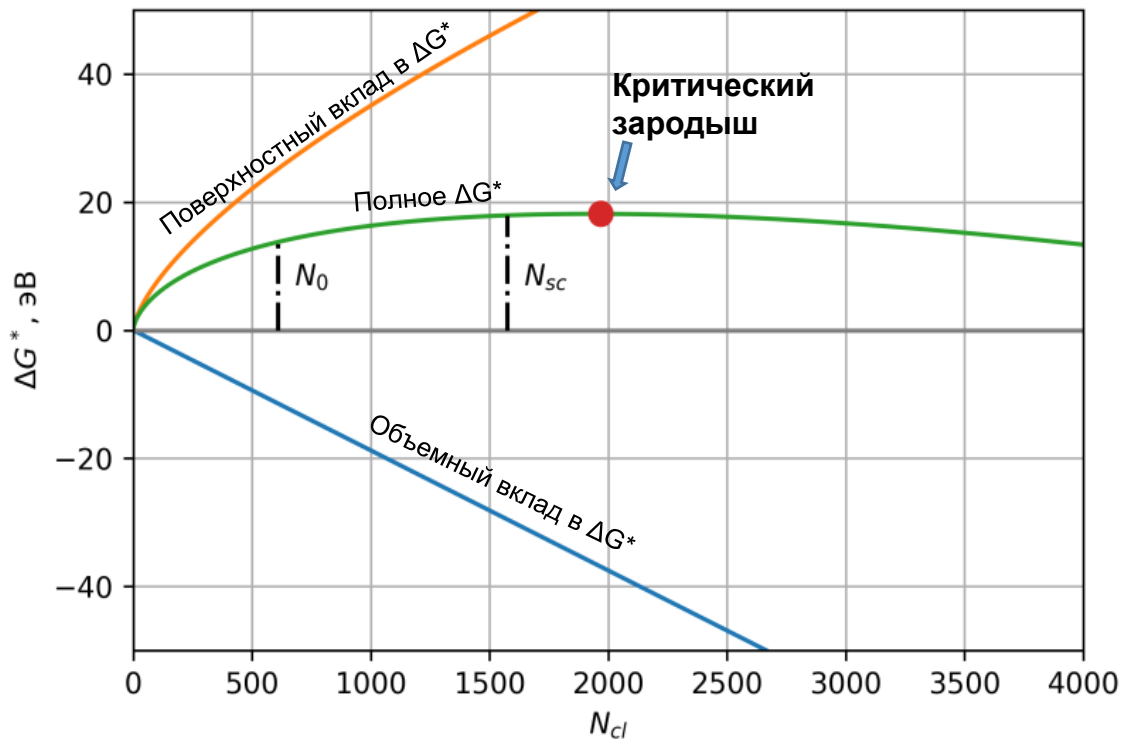
Воздействие ультразвука на расплав



Гомогенная нуклеация под действием ультразвука ?

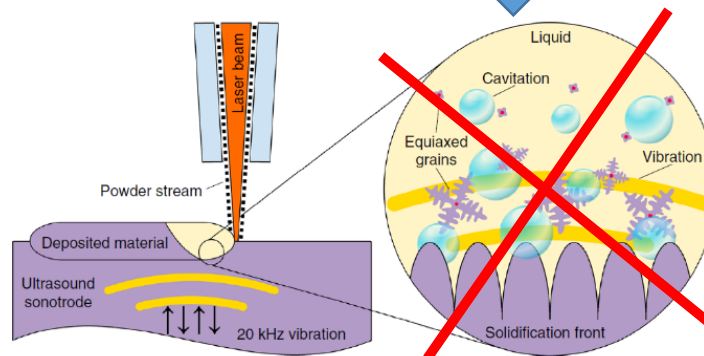
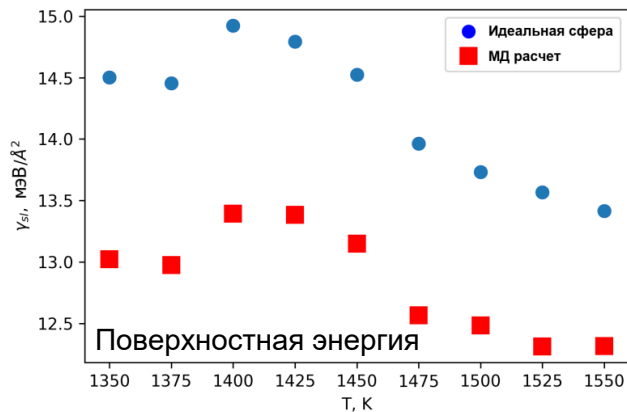
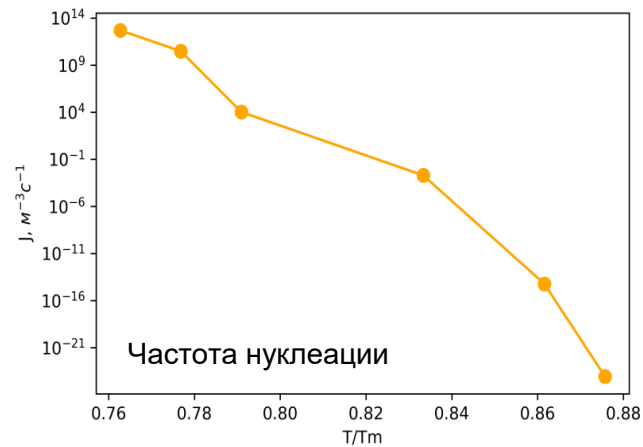
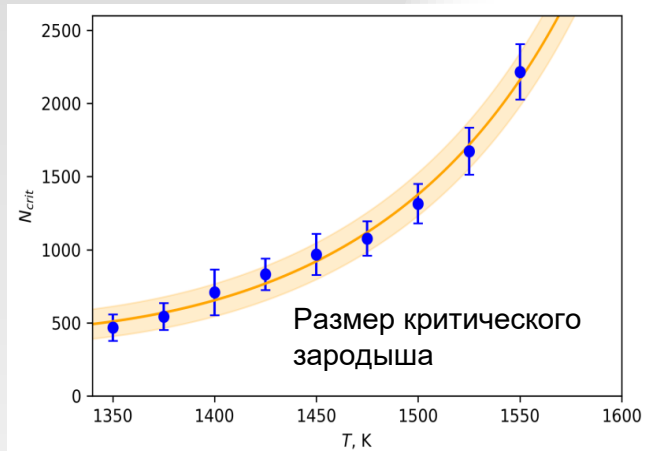


Критический зародыш

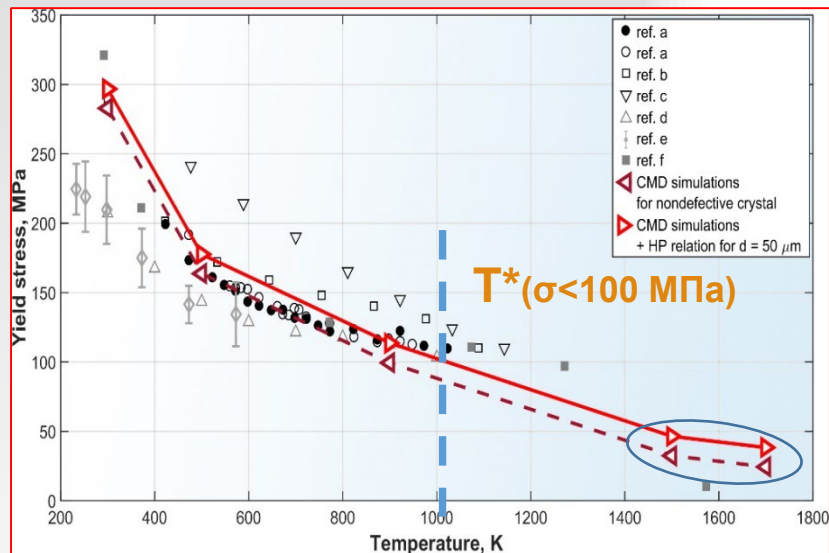


Зависимость изменения энергии Гиббса от размера зародыша при фиксированной температуре

Воздействие ультразвука на расплав

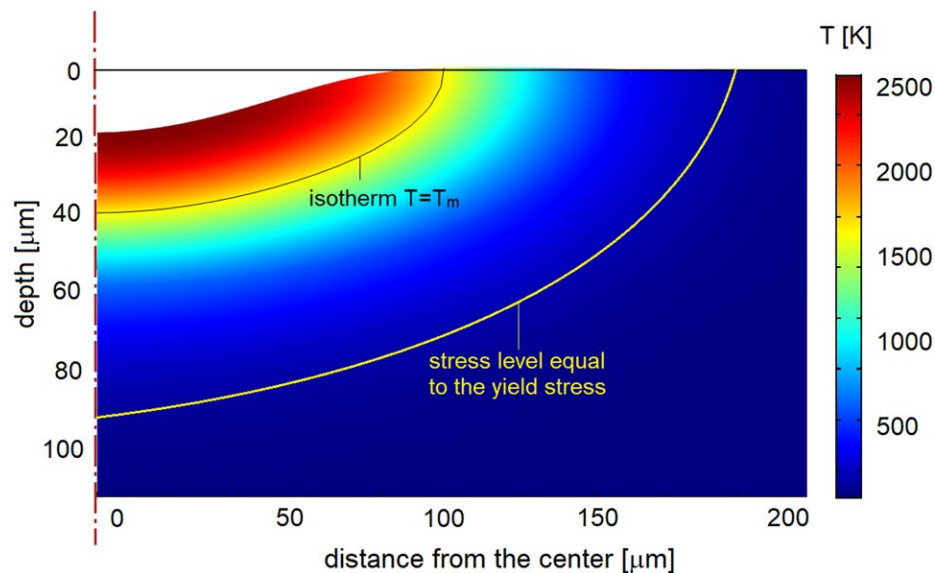


Воздействие на затвердевший материал. Расчет зависимости предела текучести стали от температуры



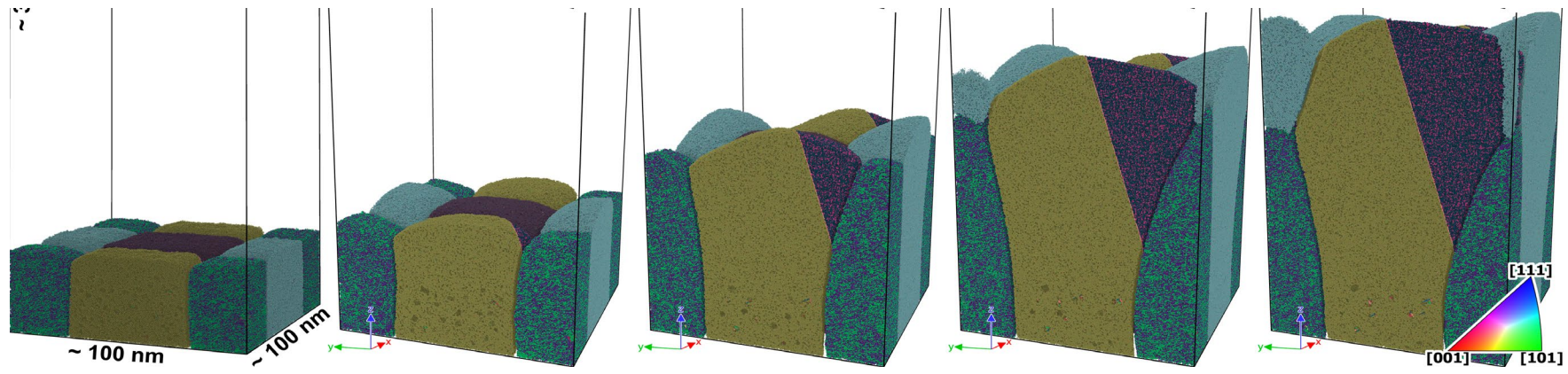
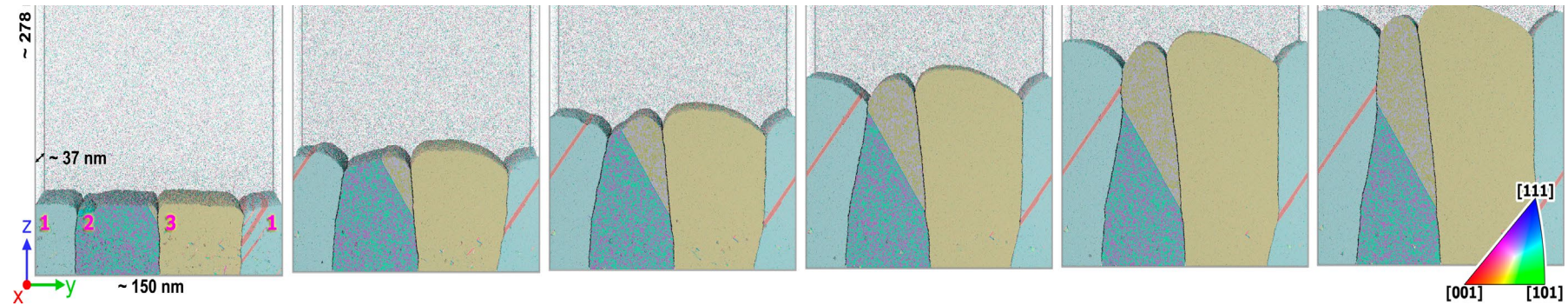
Scientific Reports, 11,
(2021) 23501.

Из-за резкого падения предела текучести с температурой существует область твердого материала вблизи фронта кристаллизации, в которой предел текучести оказывается меньше напряжений в акустической волне





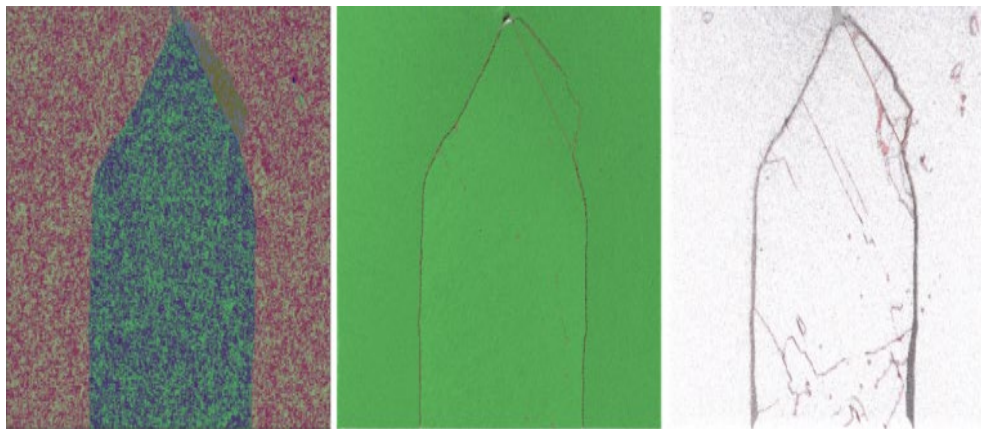
Воздействие на затвердевший материал. Прямое моделирование кристаллизации.



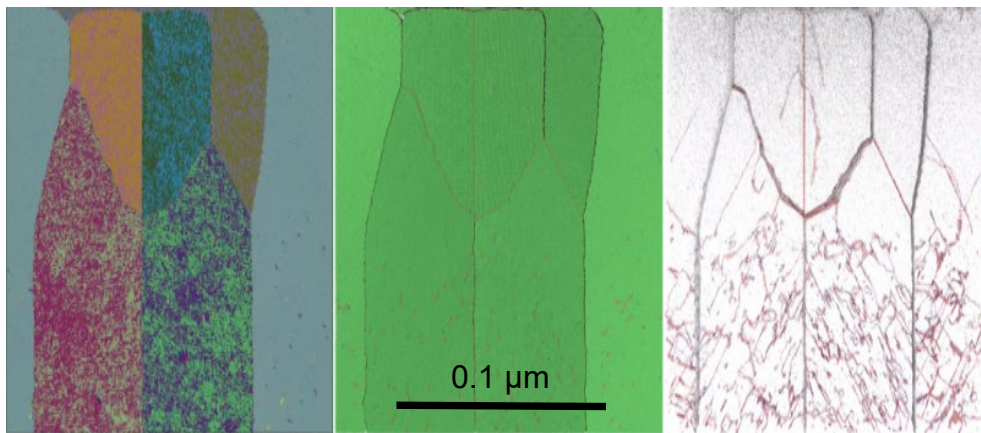


Воздействие на затвердевший материал. Прямое моделирование кристаллизации.

Направление кристаллизации ↑



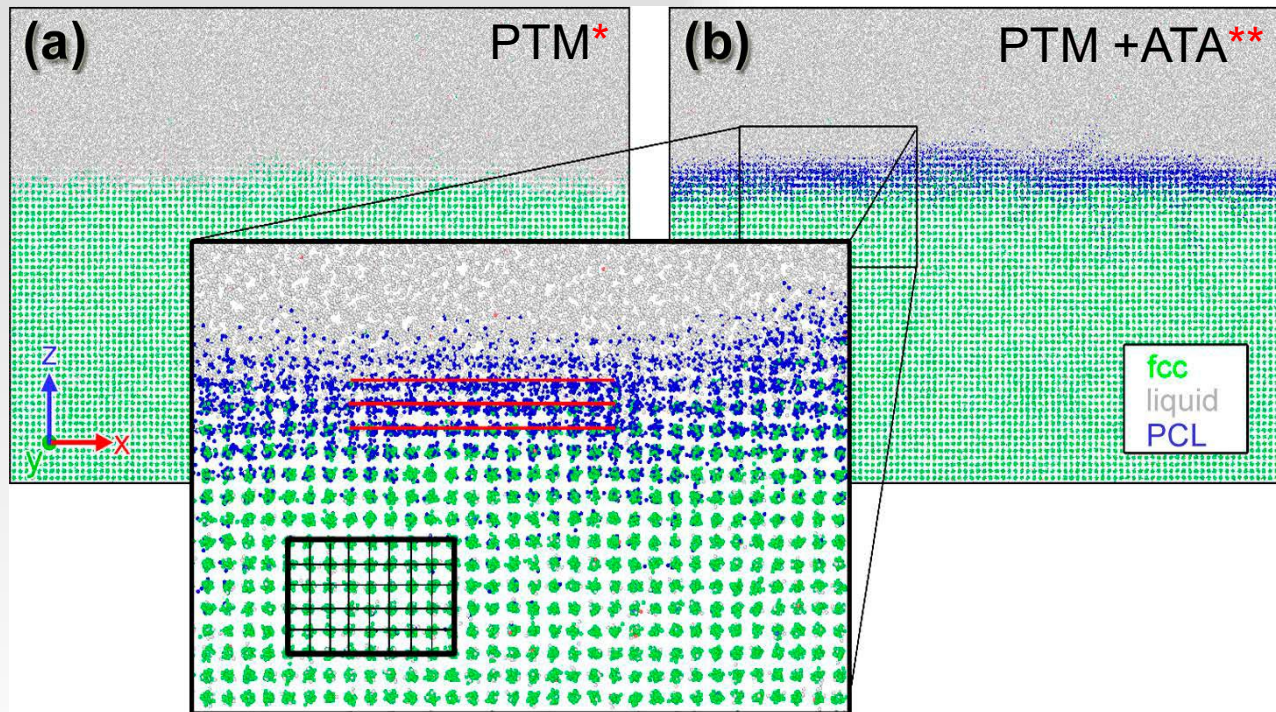
← Финальная структура без акустического воздействия



← Финальная структура при акустическом воздействии с амплитудой ~100 МПа

Эффект от пластической деформации ультразвуком нужно признать **СИЛЬНЫМ**

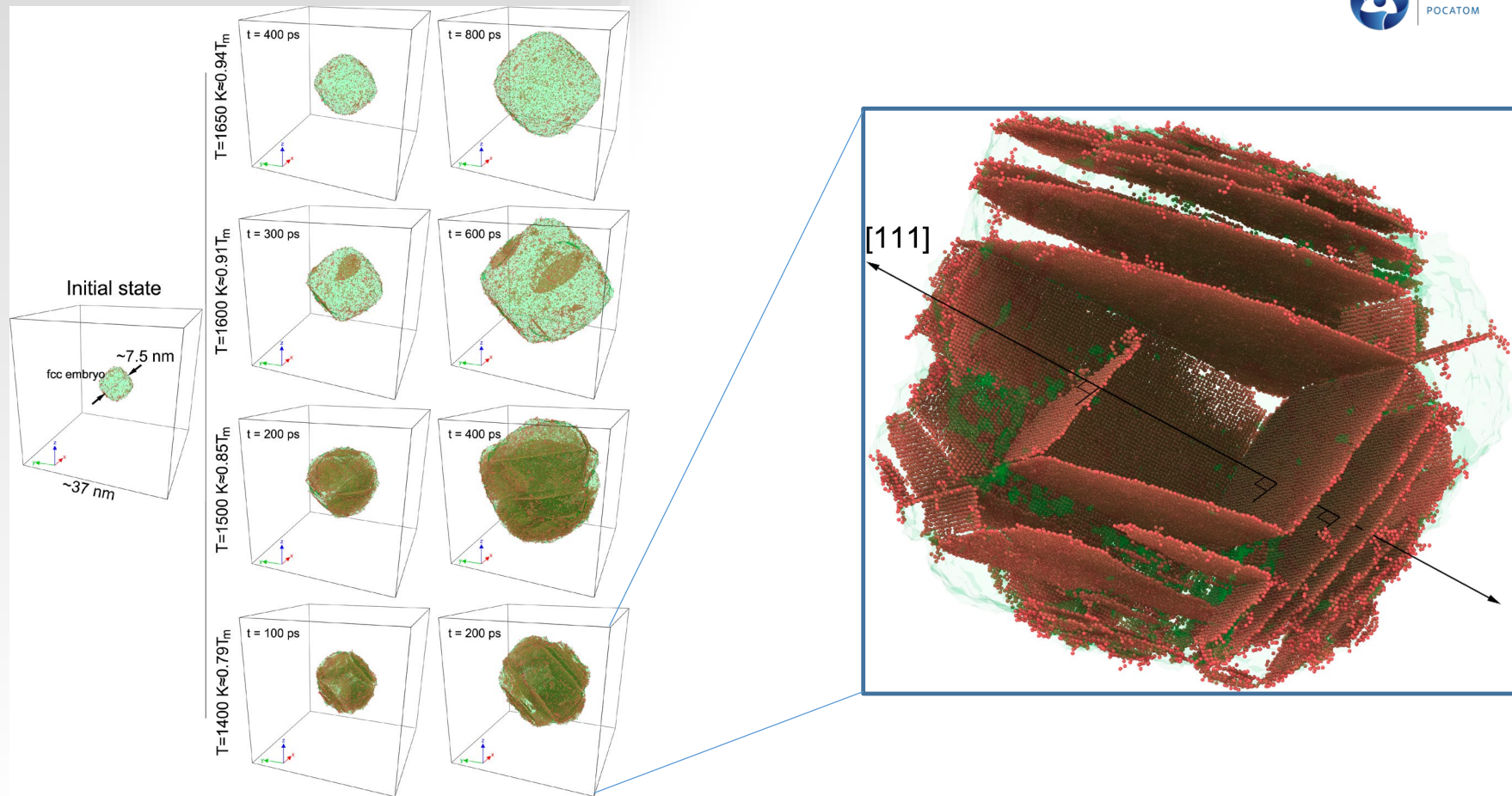
Выделение предкристаллизационного слоя (PCL)



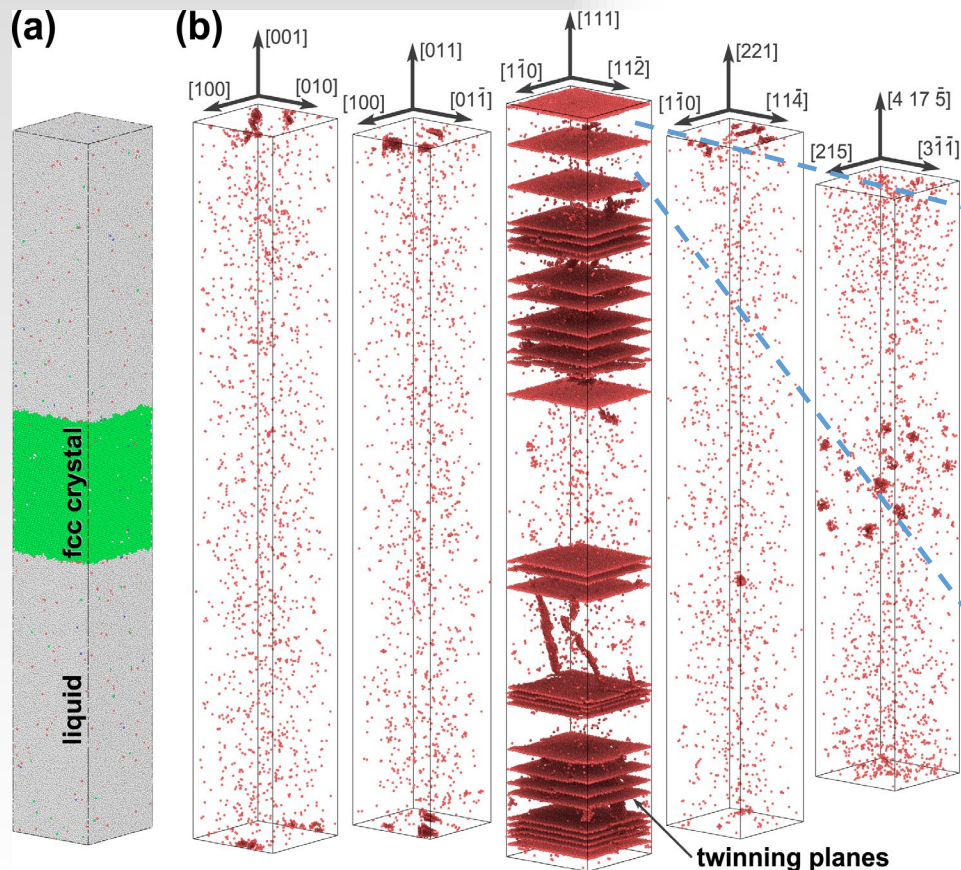
$$\leftarrow \text{PCL} = \text{FCC}_{\text{ATA}} - \text{FCC}_{\text{PTM}}$$

- * PTM - Polyhedral Template Matching
- ** ATA – Adaptive Template Analysis

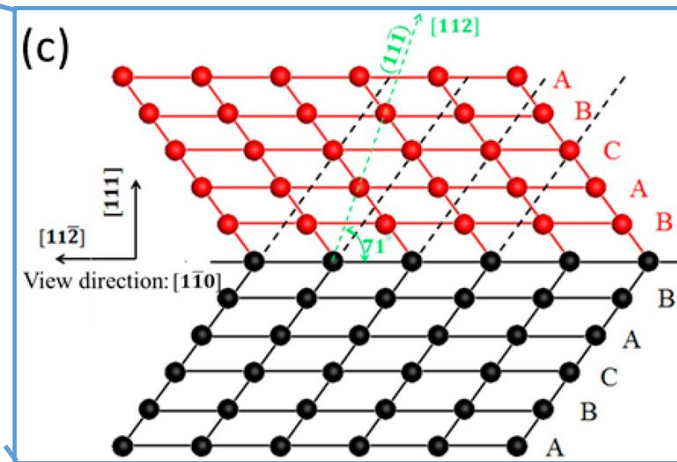
Кристаллизация изолированного зародыша



Кристаллизация в различных кристаллографических направлениях

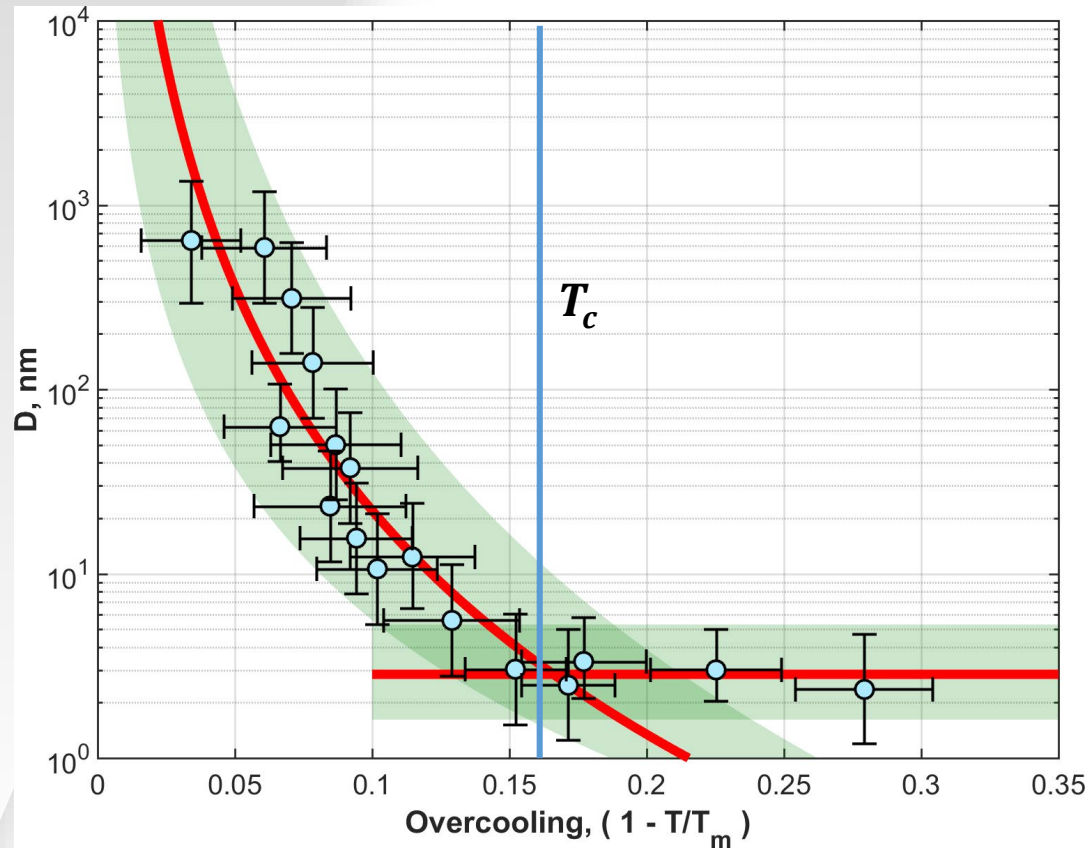


$$T = 1300\text{K} = 0.7378T_m$$

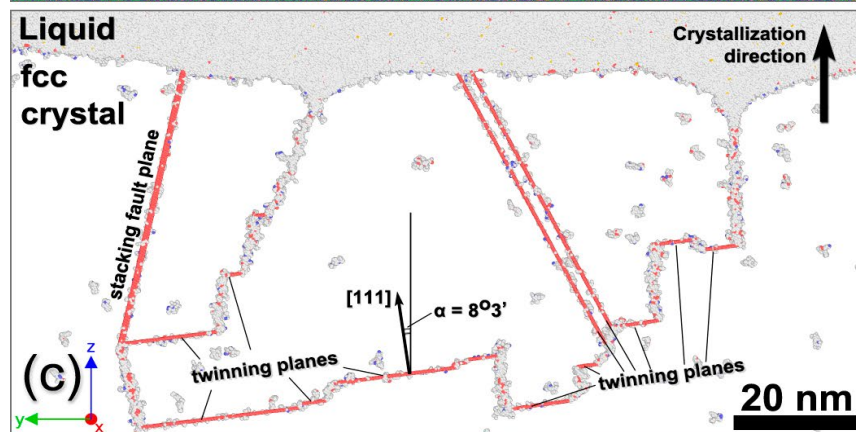
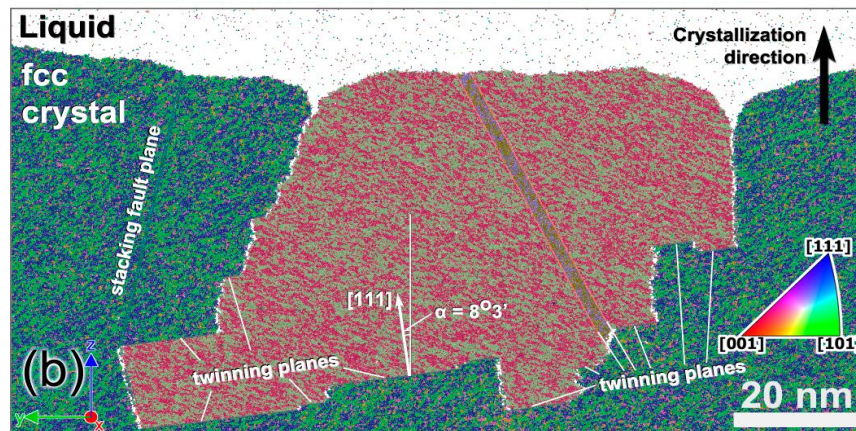
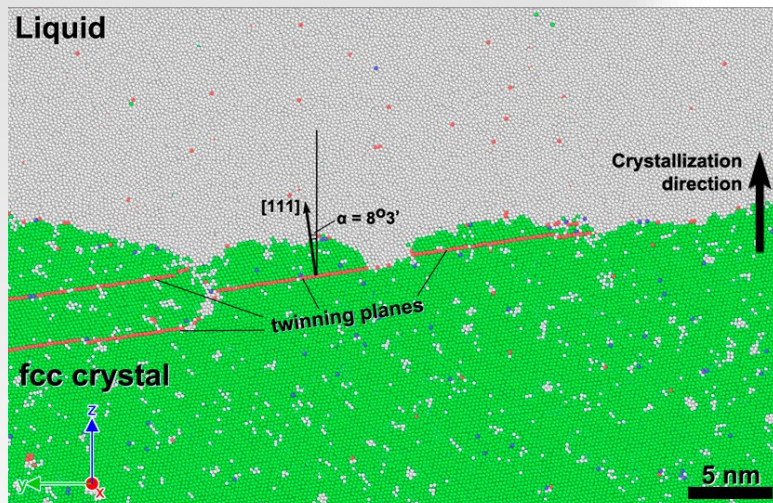


Атомная структура двойника

Размер двойников в зависимости от температуры



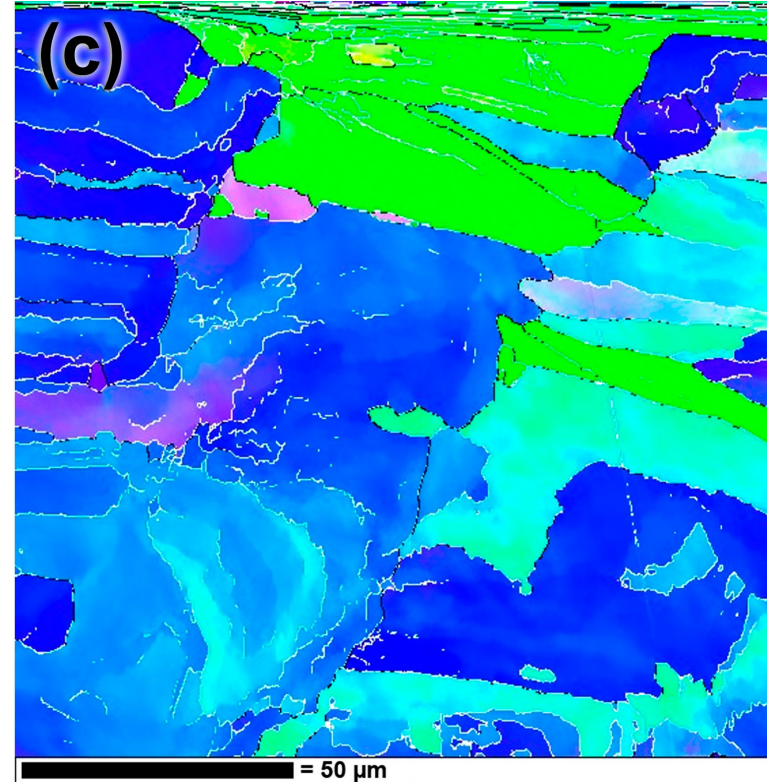
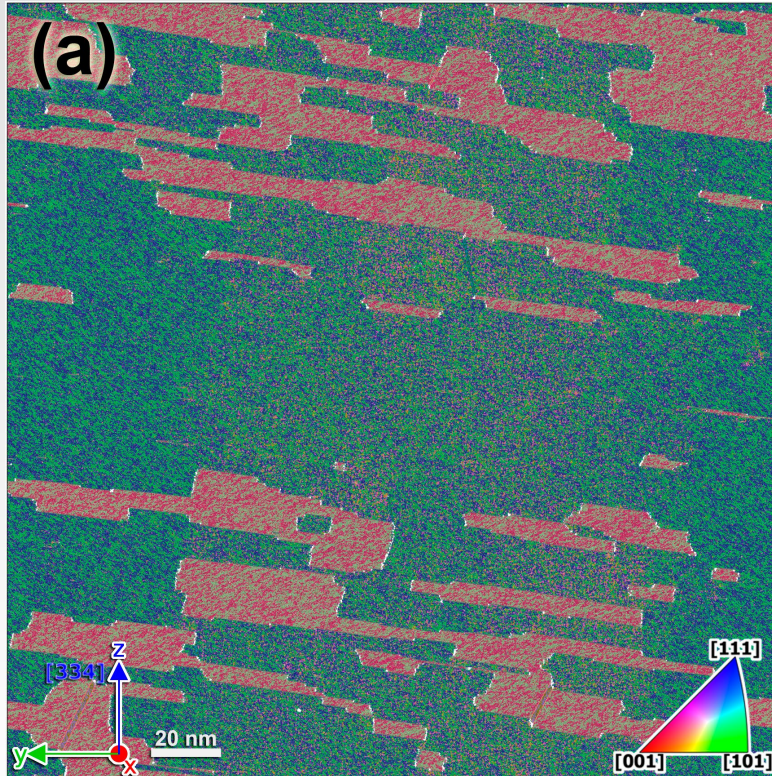
Формирование первичной микроструктуры



Формирование первичной микроструктуры

МД

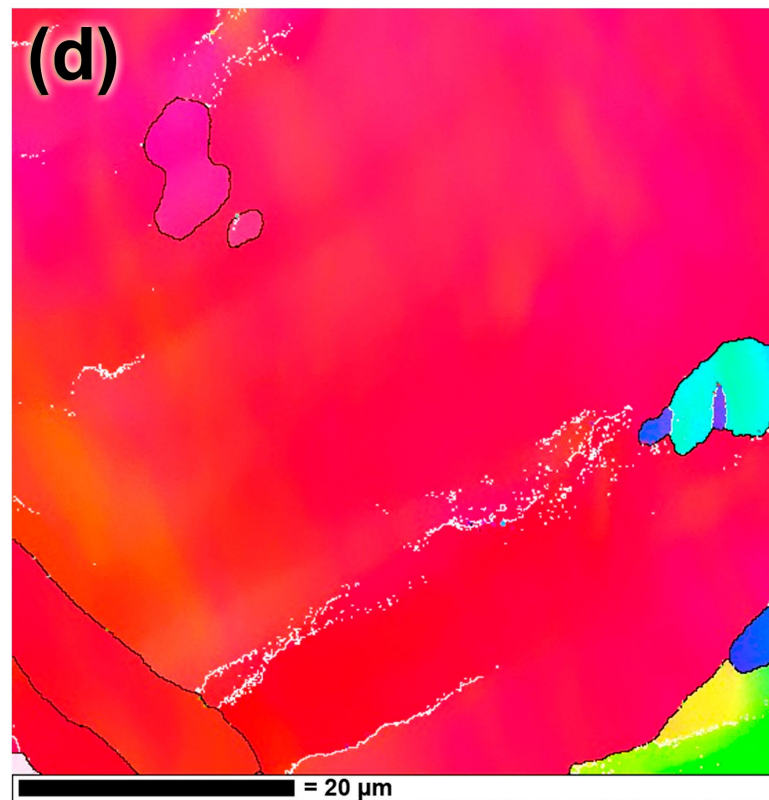
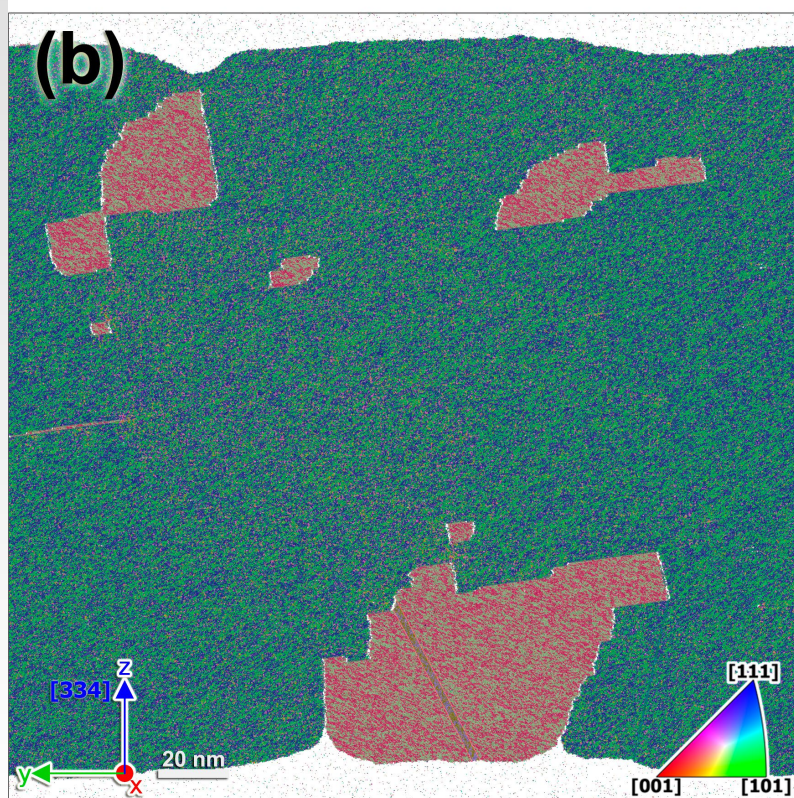
Эксп.



Формирование первичной микроструктуры

МД

Эксп.

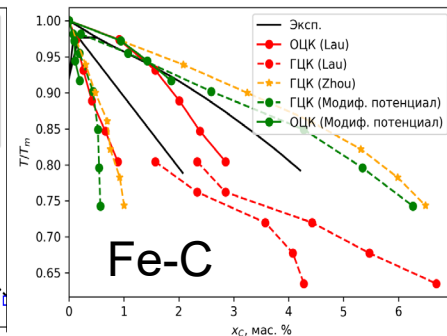
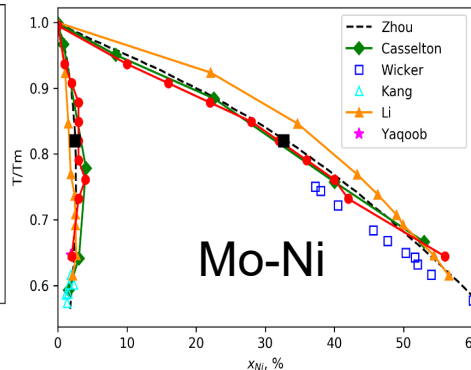
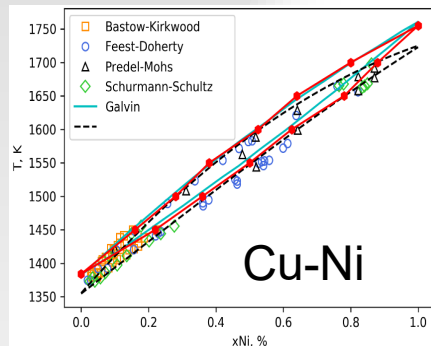


Заключение

- Современные методы молекулярной динамики позволяют проводить моделирование формирования первичной микроструктуры при условиях, свойственных СЛС;
- Рассмотренное импульсное воздействие (внешний ультразвук или импульсный лазер) приводит к изменению микроструктуры образцов, полученных методом СЛС, за счет пластического деформирования материала, находящегося в тонком слое под ванной расплава;
- Получены убедительные свидетельства существования предкристаллизационного слоя (PCL), обобщающего понятие поверхности раздела твердое тело – жидкость;
- Изучены структурные свойства PCL и их зависимость от направления кристаллизации;
- Показана роль PCL в формировании первичной двойниковой микроструктуры при быстрой кристаллизации.

Направления дальнейших исследований (или что осталось за кадром?)

1) Моделирование затвердевания сплавов с учетом солидуса и ликвидуса



2) Моделирование ликвации

