

Atomistyczne symulacje transportu masy w niejednorodnych układach międzymetalicznych

Piotr Sowa

Streszczenie

Opracowanie spójnej metodyki modelowania zjawisk transportu masy w skali atomowej w układach krystalicznych stanowi ogólny cel niniejszej pracy. W szczególności uwaga została poświęcona badaniu dwóch procesów kontrolowanych przez migrację atomów: samo- i interdyfuzji oraz relaksacji porządek-porządek uporządkowania atomowego w związkach międzymetalicznych.

Praca składa się z trzech części. W pierwszej części zostały szczegółowo omówione atomistyczne podstawy procesów dyfuzji i relaksacji. W części drugiej przedstawiono metodologię przeprowadzonych badań, gdzie opisane zostały przede wszystkim modele badanych układów oraz zastosowane techniki symulacji Monte Carlo. W ostatniej części zaprezentowano uzyskane wyniki dotyczące (i) samo-dyfuzji i relaksacji porządek-porządek w układach jednorodnych oraz (ii) procesu interdyfuzji w układach heterogenicznych (pary dyfuzyjne).

Wyprowadzona zależność między termodynamicznymi energiami aktywacji dla samo-dyfuzji i relaksacji uporządkowania atomowego pozwoliła przedstawić mierzalne doświadczalnie współczynniki samo-dyfuzji i czasu relaksacji za pomocą elementarnych wielkości, takich jak stężenie defektów i częstotliwość skoków atomowych. Poprawność znalezionej formuły sprawdzono poprzez symulowanie obu procesów w dwóch różnych systemach ze strukturą krystaliczną typu B2. Wykorzystano model energetyczny w ramach Hamiltonianu Isinga. Podczas modelowania kinetyki procesów uwzględniono zależność barier migracji dla przeskoków atomów do wakancji od lokalnej konfiguracji atomowej.

Zastosowano dwie techniki symulacji Monte Carlo. Równowagowe konfiguracje, które uwzględniały temperaturową zależność koncentracji wakancji, wygenerowano za pomocą symulacji Semi-Grand Canonical Monte Carlo (SGCMC). Natomiast migrację atomową za pośrednictwem mechanizmu wakancyjnego symulowano za pomocą algorytmu Kinetic Monte Carlo (KMC). Odtworzono i wyjaśniono doświadczalnie zaobserwowaną w związku międzymetalicznym NiAl zależność między energiami aktywacji dla samodyfuzji i relaksacji porządek-porządek.

Z kolei badanie dyfuzji w stopach heterogenicznych zostało zrealizowane przez symulację transportu masy w parze dyfuzyjnej. Główny nacisk położono na opracowanie fizycznie ugruntowanego modelu źródeł wakancji, które mogłyby być zastosowane w metodologii Monte Carlo do symulacji. Nowy algorytm został zaimplementowany w standardowym algorytmie KMC. Bazuje on na równoważeniu stężenia wakancji powstałych w wyniku procesu interdyfuzji, zgodnie z lokalną konfiguracją atomową w próbce. Testy zaproponowanego modelu źródeł wakancji przeprowadzono w oparciu o współczynniki interdyfuzji, efekty korelacyjne oraz zjawisko Kirkendalla wynikające z symulacji układów niewykazujących uporządkowania, jak i układach z uporządkowaniem atomowym. Wyniki uzyskano pośrednio w oparciu o teorię Darkena-Manninga na podstawie współczynników korelacji zmierzonych przez symulacje KMC oraz bezpośrednio za pomocą metody Boltzmanna-Matano zastosowanej do wygenerowanych metodą KMC profili koncentracji składników. Otrzymane rezultaty pozwoliły ocenić prawidłowość opracowanego modelu bezpośrednich symulacji pary dyfuzyjnej poprzez porównanie rezultatów wynikających z obu podejść.