

РАСЧЕТ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ КАРБИДА ТИТАНА ПРИ НУЛЕВОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А.М. Демьяненко, И.Ф. Головнев, В.М. Фомин

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Карбид титана - соединение состава TiC_x ($x = 0,47-0,99$), представляющее собой фазу внедрения с широкой областью гомогенности; серые кристаллы с кубической решеткой типа NaCl. Карбид титана состоит из равного числа ионов углерода и титана, размещенных в чередующихся точках простой кубической решетки таким образом, что ближайшими соседями каждого иона являются шесть ионов другого вида. Подобная структура может быть описана как вложение двух г. ц. к. решеток со смещением на $a/2$ относительно друг друга вдоль одной из осей координат, где $a = 4.328 \text{ \AA}$ – параметр кристаллической решетки карбида титана.

Как формирование наноструктур в современных нанотехнологиях, так и дальнейшее их функциональное использование часто сопровождается значительными температурными нагрузками (например, прохождение тока через контакты в микроэлектронных схемах). В связи с этим возникла необходимость исследования термодинамических свойств наноструктур. Наиболее обоснованный подход к получению уравнения состояния произвольной системы, находящейся в термодинамическом равновесном состоянии, дает статистическая физика. Зная функцию Гамильтона системы можно найти свободную энергию либо внутреннюю энергию. Зная эти термодинамические функции, можно описать все термодинамические характеристики системы, в том числе и получить уравнение состояния:

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$$

Однако пройти этот путь до конца удалось лишь для расчета термодинамики газов. Для твердых тел этот подход использовали Ми и Грюнайзен [1,2], рассматривая тело как систему классических осцилляторов. Хотя теория Ми и Грюнайзена не позволила рассчитать термодинамику твердых тел из первых принципов, но она дала структуру термического и калорического уравнений состояния. Это позволило построить молекулярно-динамический подход для расчета термодинамики твердотельных наноструктур и, в конечном итоге, используя свойства скейлинга, макроскопических твердых тел.

Метод молекулярной динамики описывает атомы как частицы, движущиеся по законам Ньютона, но при этом используются силы, полученные с помощью приближенных квантово-механических подходов. Метод позволяет, интегрируя траектории частиц, осуществлять моделирование систем, содержащих до нескольких сотен тысяч атомов. Важно, что для моделирования определенного процесса не требуется рассчитывать заранее многочисленные величины, специфичные для определенного физического процесса, как в методе Монте-Карло. Достаточно знать потенциал, который хорошо описывает свойства вещества в интересующей исследователя области. В данной работе взаимодействие атомов в системе описывается с помощью многочастичного потенциала, разработанного на основе модифицированного метода погруженного атома с учетом ближайших соседей

второго порядка [3]. Расчеты проводились с помощью свободно распространяемого пакета программ молекулярно-динамического моделирования Lammmps [4].

В работе проведен расчет холодных составляющих (при нулевой температуре) термического и калорического уравнений состояния карбида титана. Начальные данные находились следующим образом. Из кристалла идеальной кристаллической структуры V1 карбида титана строился кластер сферической формы. Разделение на поверхностные и объемные атомы велось по количеству ближайших соседей. Так как наноструктура обладает чрезвычайно развитой поверхностью, то в результате построенный кластер не лежит в минимуме потенциальной энергии. Таким образом на следующем этапе находился минимум потенциальной энергии системы с помощью метода искусственной вязкости [5]. Для моделирования изотермического процесса сжатия (растяжения) наноструктуры а качестве внешнего параметра задавалось давление P_0 на поверхности. Для гашения ударно-волновых процессов в сфере применялся метод линейного нарастания сил, действующих на поверхностные атомы, от нуля до заданного значения и искусственная вязкость. На рисунках 1 и 2 приведены зависимости изменения полной энергии кластера и холодных составляющих давления.

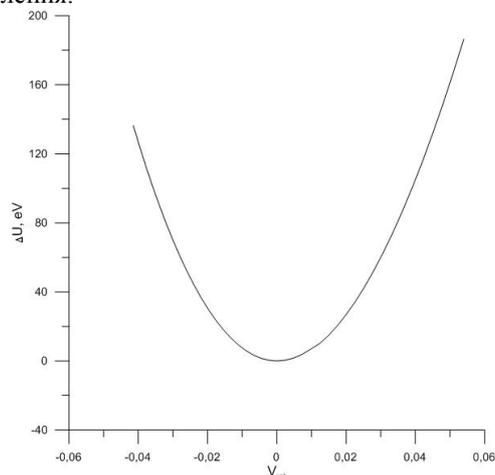


Рис. 1. Зависимость изменения полной энергии кластера от относительного изменения объема

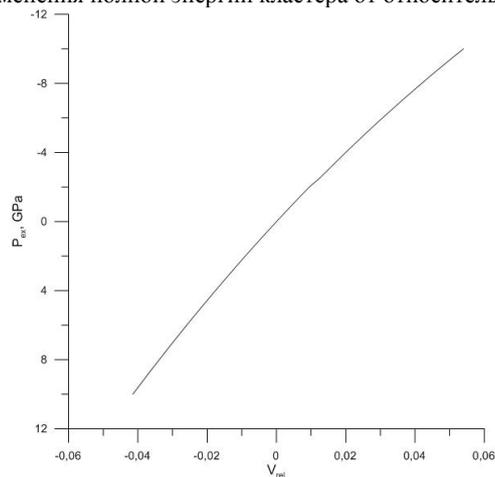


Рис. 2. Зависимость холодного давления в кластере от относительного изменения объема

Полученные координаты и импульсы атомов в дальнейшем могут быть использованы в качестве начальных данных для расчета температурных зависимостей тепловых составляющих уравнений состояния TiC для изохорических процессов, что позволит на основе уравнения Гиббса – Гельмгольца построить термодинамический потенциал для TiC – свободную энергию в температурном интервале до фазового перехода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Mie G.** Zur kinetischen Theorie der einatomigen Körper // *Annalen der Physik* 316.8, p. 657-697.
2. **Grüneisen E.** Theorie des festen Zustandes einatomiger Elemente // *Annalen der Physik*, 344(12), 257-306.
3. **Kim Y.-M., Lee B.-J.** Modified embedded-atom method interatomic potentials for the Ti–C and Ti–N systems // *Acta Mater.* 56 (2008) 3481–3489.
4. **Plimpton S.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comp. Phys.* 117 (1995) 1–19.
5. **Головнева Е. И., Головнев И. Ф., Фомин В. М.** Моделирование квазистатических процессов в кристаллах методом молекулярной динамики // *Физ. мезомеханика.* 2003. Т. 6, № 6. С. 5–10.