

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРЫ ЖИДКОГО ЖЕЛЕЗА

А.Г. Воронцов, Д.К. Белащенко

В статье проведено исследование атомных моделей расплава железа при температурах от 1833 до 2023 К. Анализ атомной структуры методом Вороного–Делоне показал, что при температурах 1833–1923 К структура изменяется незначительно, в то время как в диапазоне температур 1923–2023 К происходят ощутимые изменения. Около температуры плавления велика доля плотноупакованных фрагментов, а при температуре 2023 К жидкое железо приближается к модели случайной плотноупакованной жидкости.

Введение

Вопреки существовавшему несколько десятилетий назад мнению, сейчас известно, что расплавы металлов претерпевают существенные изменения структуры при нагреве, что чрезвычайно важно для решения прикладных задач материаловедения. Основные трудности при определении изменений в расплавах металлов связаны с их постепенностью и малым количеством экспериментальных данных. Высокие температуры и повышенная реакционная способность сильно затрудняют постановку качественных экспериментов. Появление мощных компьютеров сделало возможным получение компьютерных моделей структуры расплава, воспроизводящих доступные экспериментальные данные по структуре. Это открыло дорогу для анализа изменений происходящих в расплавах и качественном их понимании.

Целью этой работы является исследование моделей расплава железа в диапазоне температур 1833–2023 К с помощью статистико-геометрических методов и определение структурных изменений в нем.

Метод

Для исследования температурных изменений расплава Fe были использованы модели, построенные по данным дифракционного эксперимента методом Реатто [1]. В этом методе парный атомный потенциал выбирается так, чтобы метод молекулярной динамики с этим потенциалом правильно воспроизводил функцию радиального распределения, известную из эксперимента. Были получены модели, содержащие 4000 атомов. Сравнение экспериментальных и модельных функций радиального распределения для двух температур приведено на рис. 1. Экспериментальная и модельная функции радиального распределения практически неразличимы.

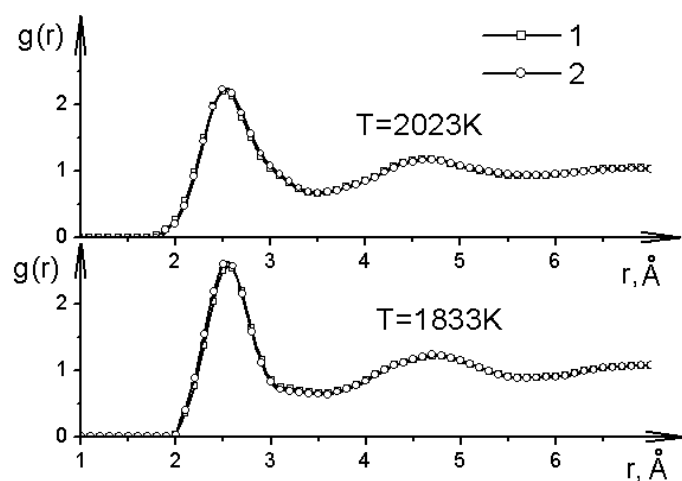


Рис. 1. Функции радиального распределения расплава железа при температурах 1833 и 2023К: 1 – эксперимент, 2 – модель

Для анализа информации, заключенной в моделях использовался метод Вороного–Делоне [2]. В этом методе все пространство разбивается на фигуры простой формы: многогранники Вороного или симплексы Делоне. Разбиение пространства на многогранники Вороного или симплексы Делоне строится без использования трансляционной симметрии, что определило применение этого метода для изучения статистических закономерностей жидкостей и аморфных веществ.

Многогранник Вороного – область пространства, находящаяся ближе к одному из атомов, чем к остальным, является обобщением ячейки Вигнера–Зейца для неупорядоченных структур. Атомы, чьи МВ имеют общую грань,

плексам, присутствующим в немного деформированных плотноупакованных кристаллах [2]. По результатам представленным на графике можно отметить незначительные изменения в диапазоне температур 1833–1923 К и заметное снижение доли правильных тетраэдров в интервале температур 1923–2023 К. Зависимость октаэдричности от температуры менее наглядна, но на ней так же проявляются незначительные изменения при температурах 1833–1923 К, которые становятся более заметны при температурах 1923–2023 К.

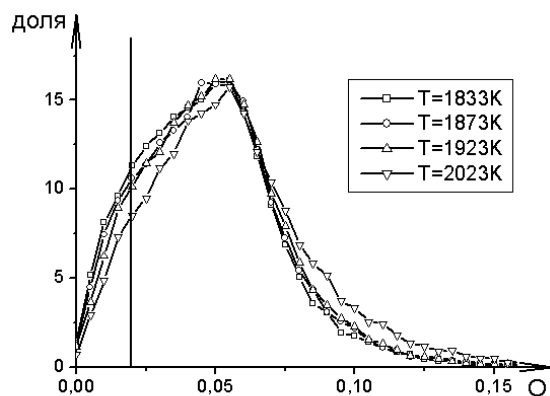


Рис. 4. Распределение симплексов Делоне по значению меры октаэдричности в моделях расплава железа при различных температурах

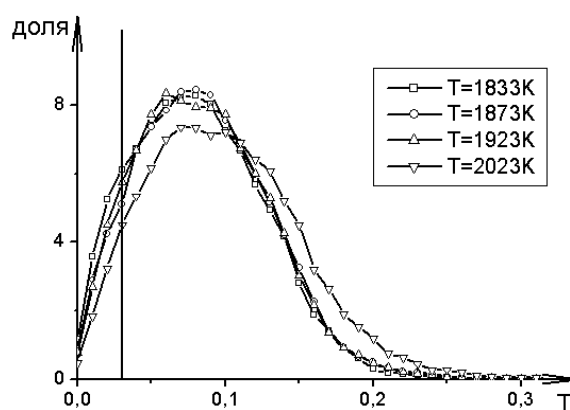


Рис. 5. Распределение симплексов Делоне по значению меры тетраэдричности в моделях расплава железа при различных температурах

Исследование числа соседей симплицальных полостей является наглядным способом оценить изменения пространственной геометрической структуры. Эти параметры не зависят от плотности системы, а характеризуют изменение взаимного расположения атомов [5]. Изменение доли симплицальных полостей с различным числом соседей представлено на рис. 6. Можно заключить, что расплав железа вблизи температуры плавления обладает плотной структурой, с доминирующим числом симплексов n2. Доля симплексов n2 составляет порядка 45 %, что свойственно структурам с плотной упаковкой (в идеальных кристаллах ГЦК и ГПУ доля симплексов n2 = 66 %). При повышении температуры доля симплексов n2, характерных для плотных структур падает до 40%, а доля симплексов n3 и n4, характерных для рыхлых структур, растет и достигает около температуры 2023 К 29 % и 19 % соответственно. Такое соотношение более характерно для идеальной случайной плотноупакованной [6] жидкости.

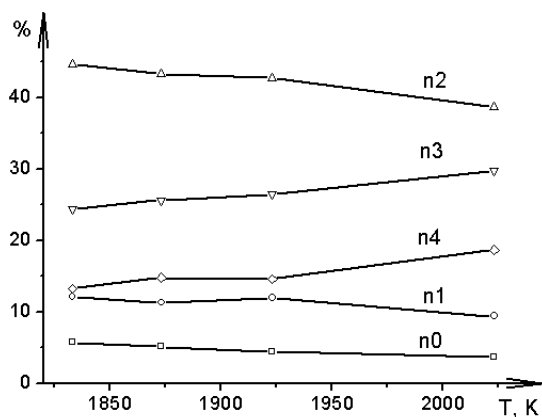


Рис. 6. Доля симплексов с различным числом соседей в моделях расплава железа при различных температурах

Заключение

В данной работе проанализированы модели расплава железа при нескольких температурах, от 1833 до 2023 К. Анализ атомной структуры методом Вороного–Делоне показал, что при температурах 1833–1923 К структура изменяется незначительно, в то время как в диапазоне температур 1923–2023 К происходят ощутимые изменения. Около температуры плавления велика доля плотноупакованных фрагментов, а при температуре 2023 К жидкое железо приближается к модели случайной плотноупакованной жидкости

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 03-03-32368-а, № 04-02-96013-р2004урал_а.

Литература

1. L. Reatto, D. Levesque and J.J. Weis Iterative Predictor-corrector method for extraction of the pair interaction from structural data for dense classical liquids // Phys. Rev. A. – 1986. – V. 33. – № 5. – P. 3451–3465.
2. Медведев Н.Н. Метод Вороного–Делоне в исследовании структуры некристаллических систем. – Новосибирск: Изд-во СО РАН. – 2000. – 214 с.
3. V.P. Voloshin, S. Beaufils and N.N. Medvedev Void space analysis of the structure of liquids // Journal of molecular liquids. – 2002. – V. 96–97. – P.101–112.
4. Воронцов А.Г., Мирзоев А.А., Гельчинский Б.Р. Анализ межатомного пространства в жидком цезии // ЖФХ. – 2003. – Т. 77. – № 11. – С. 1800–1804.
5. Воронцов А.Г., Гельчинский Б.Р. Статистико-геометрическое исследование структуры расплавов цезия и ртути // Труды XI Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов». – Т. 1. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2004. – С. 204–208.
6. Займан Дж. Модели беспорядка. – М.: Мир, 1982. – 592 с.

Поступила в редакцию 3 марта 2005 г.