

УДК 538.95

Атомистическое моделирование нуклеации в метастабильных расплавах металлов при
растяжении

Н.Ю. Лопаницына^{1,2} А.Ю.Куксин²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Объединенный институт высоких температур РАН

lopanitsyna@phystech.edu

В последнее время интенсивно исследуются возможности наноструктурирования поверхностей под воздействием субпикосекундных лазерных импульсов. В частности, в экспериментах [1] при облучении алюминия наблюдалось образование последовательных нанопичков с регулярными интервалами между ними, что было интерпретировано как проявление развития неустойчивости при спиnodальном распаде расплава при растяжении. Также интерес к металлам при больших отрицательных давлениях связан с явлением абляции, вызванного действием субпикосекундных лазерных импульсов на поверхность металла. В молекулярно-динамических [2, 3] и гидродинамических [3] расчетах данного процесса наблюдаются плавление материала, растяжение расплава, появление и рост полостей в метастабильной жидкой фазе. Делаются попытки определить предельные напряжения, достижимые в расплаве при высокоскоростной деформации, на основе экспериментов с субпикосекундными лазерными импульсами [3]. Определение прочности на растяжение при деформации металлического расплава представляет интерес из-за проблем, связанных с получением наночастиц при абляции вещества с поверхности под действием лазерного или сильнофокусированного электронного облучения.

В настоящей работе на основе молекулярно-динамического моделирования на примере алюминия, железа и молибдена исследуются характеристики метастабильного растянутого расплавленного состояния и анализируются процессы, происходящие при зарождении полостей. Все расчеты проводились с использованием пакета программ для атомистического моделирования LAMMPS, применялись межатомные потенциалы взаимодействия в форме потенциала погруженного атома.

На основе метода, описанного в [4], проведен расчет скорости зарождения полостей в зависимости от температуры (до 5000 К) и плотности расплавов: железа, алюминия, молибдена. Проведена проверка применимости классической теории нуклеации для описания частоты зарождения полостей в расплаве. Сделана аппроксимация полученных данных на основе классической теории нуклеации с поправкой Толмана, учитывающей зависимость поверхностного натяжения от радиуса кривизны. В свою очередь, длина

Толмана была оценена из независимых молекулярно-динамических расчетов. Получена зависимость поверхностного натяжения от радиуса пузырька. Проведена оценка критических радиусов зародышей на основе молекулярно-динамических расчетов для расплавов железа и молибдена. На основе полученных данных делается оценка динамической прочности жидких металлов в зависимости от скорости растяжения. Проведено сравнение прочности, рассчитанной на основе классической теории нуклеации, непосредственно с прямым молекулярно-динамическим расчетом в системе большого размера. Все расчеты и анализ проведены в рамках нескольких модельных систем. Для описания динамической прочности реальных металлов рекомендуется использовать экспериментальные данные о поверхностном натяжении на плоской границе [5] и величину поправки Толмана из атомистического моделирования.

Литература

1. *Ионин А.А. [и др.]* Наномсаштабная кавитационная неустойчивость поверхности расплава вдоль штрихов одномерных решеток нанорельефа на поверхности алюминия // Письма в ЖЭТФ – 2011. – том 94. – С. 289-292
2. *Starikov S.V., Pisarev V.V.* // Journal of Applied Physics – 2015 – v. 117 – № 13 – p. 135901.
3. *Агранат М.Б., Анисимов С.И., Ашитков С.И. и др* // Письма в ЖЭТФ – 2010 – т. 91 – с. 517.
4. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Гомогенная нуклеация в перегретом кристалле. Молекулярно-динамический расчет // Доклады академии наук — 2002. – Т. 386, № 3. – С. 1-5.
5. *Филлипов К.С.* Плотность и поверхностное натяжение расплавов железа, никеля и Fe-Cr-Ni сплава, полученных из металла с различной исходной структурой // Физика и химия обработки материалов – 2011. – № 1. – С. 94–97.