

випадкового числа. У даному випадку, це реалізується зміщенням атомів у реальному просторі за певним ймовірнісним алгоритмом.

У даній роботі проведено дослідження фазових рівноваг методом дифузійної пари для бінарних сплавів із гранецентрованою кубічною (ГЦК) решіткою з обмеженою розчинністю компонентів. Для реалізації поставленого завдання було створено комп'ютерні Монте-Карло моделі для обмінного і вакансійного механізмів за алгоритми Глаубера, Метрополіса та RTA (Residence Time Algorithm). Для визначення впливу орієнтації міжфазної межі на рівноважні концентрації фаз системи було розглянуто дві кристалографічні орієнтації (001) та (111) із використанням модифікованих періодичних граничних умов зі зміщенням.

За результатами аналізу серії комп'ютерних експериментів побудовано модельні фазові діаграми бінарного розчину з ГЦК граткою і проведено порівняння з класичною теоретичною моделлю регулярного твердого розчину. Встановлено, що залежність різниці приведених температур теоретичної та модельної кривих фазових рівноваг від концентрації, для різних методів моделювання, є прямолінійною та не залежить від ймовірнісного алгоритму і механізму реалізації Монте-Карло алгоритму.

Науковий керівник: к. ф.-м. н., доцент Пасічний М. О.

В. М. Пасічна

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

МОДЕЛЮВАННЯ НУКЛЕАЦІЇ ПРИ РОЗПАДІ ТА УПОРЯДКУВАННІ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Розпад та упорядкування сплавів є основою багатьох важливих технологічних процесів, зокрема: старіння сплавів; зміцнення сплавів дрібнодисперсними включеннями, які слугують стопорами для розповсюдження тріщин; створення дифузійних бар'єрів із високо впорядкованих фаз; з'єднання матеріалів за допомогою впорядкованих фаз (наприклад, утворення і ріст зерен впорядкованої фази Cu_6Sn_5 при пайці); утворення впорядкованих з'єднань цинку, бору, алюмінію при нанесенні захисних покриттів; утворення високо впорядкованої фази $NiAl$ у реакціях СВС (самопоширюваного високотемпературного синтезу). Особливо важливо контролювати кінетику вказаних процесів на всіх стадіях процесу, зокрема, на початкових стадіях. Вказані процеси розпаду та упорядкування зазвичай є фазовими переходами І-роду і для своєї реалізації вони вимагають подолання нуклеаційного бар'єру, тобто, утворення життєздатних закритичних зародків нової фази в надрах старої. Цей процес найменше вивчений експериментально, оскільки вимагає використання найновіших експериментальних методів, які не були доступні 20 років тому. На сьогодні існують методи тривимірної атомної томографії, високороздільної просвічуючої електронної мікроскопії. Тому, хоч і з труднощами, тепер ми таки можемо спостерігати зародки, але не *in situ*, тобто не в процесі зародкоутворення, а після нього. Існує багато теорій нуклеації, починаючи із Гіббса, Фольмера, Френкеля, Зельдовича, Тернбола, і не так багато детальних комп'ютерних кінетичних моделей нуклеаційних стадій цих процесів. Тому наша поставлена задача є безумовно актуальною.

Мета – дослідити методом Монте-Карло кінетику гомогенної нуклеації при розпаді бінарного твердого розчину (для сплавів, які розпадаються), а також кінетику упорядкування сплавів (для сплавів, які впорядковуються) в залежності від пересичення і температури.

Завдання:

1. Побудувати фазову діаграму стану бінарного твердого (для розчину який має тенденцію до розпаду, $E_{mix} > 0$) методом МК.
2. Підібрати критерії зародкоутворення, тобто ті мінімальні характеристики зародка, після досягнення яких його ріст стає практично незворотнім.

3. Провести комп'ютерний експеримент та отримати залежності інкубаційного часу від пересичення бінарного твердого розчину за різних зведених температур. Тут під інкубаційним часом мається на увазі час до появи першого необоротного (закритичного) зародка.

4. Порівняти отримані результати комп'ютерного експерименту з класичною теорією нуклеації Фольмера-Беккера-Дьорінга-Зельдовича.

5. Перейти до сплавів з тенденцією до упорядкування ($E_{mix} < 0$). Розглянути впорядкування стехіометричного сплаву A_3B з ГЦК ґраткою з утворенням впорядкованої фази $L1_2$ для обох напрямків зміни температури. Побудувати МК методом залежність рівноважного параметру порядку від температури.

6. Оцінити методом МК залежність інкубаційного часу утворення стехіометричної впорядкованої фази A_3B з неупорядкованої від переохолодження.

7. Оцінити методом МК залежність інкубаційного часу утворення впорядкованої фази A_3B з неупорядкованої від відхилення концентрації від стехіометрії.

Методика дослідження. Дослідження використовує стандартний метод Монте-Карло, алгоритм Метрополіса з обмінним механізмом. Для більшої довіри до результатів перед дослідженням кінетики нуклеації досліджується термодинаміка відповідних систем і будуються рівноважні діаграми станів.

Висновки:

1. Комп'ютерний експеримент методом Монте-Карло прогнозує лінійну залежність логарифму інкубаційного часу розпаду пересиченого твердого розчину від оберненого квадрату пересичення. Цей результат моделювання узгоджується з передбаченнями класичної нуклеаційної теорії, в якій зародок народжується відразу майже оптимального складу, а далі просто росте.

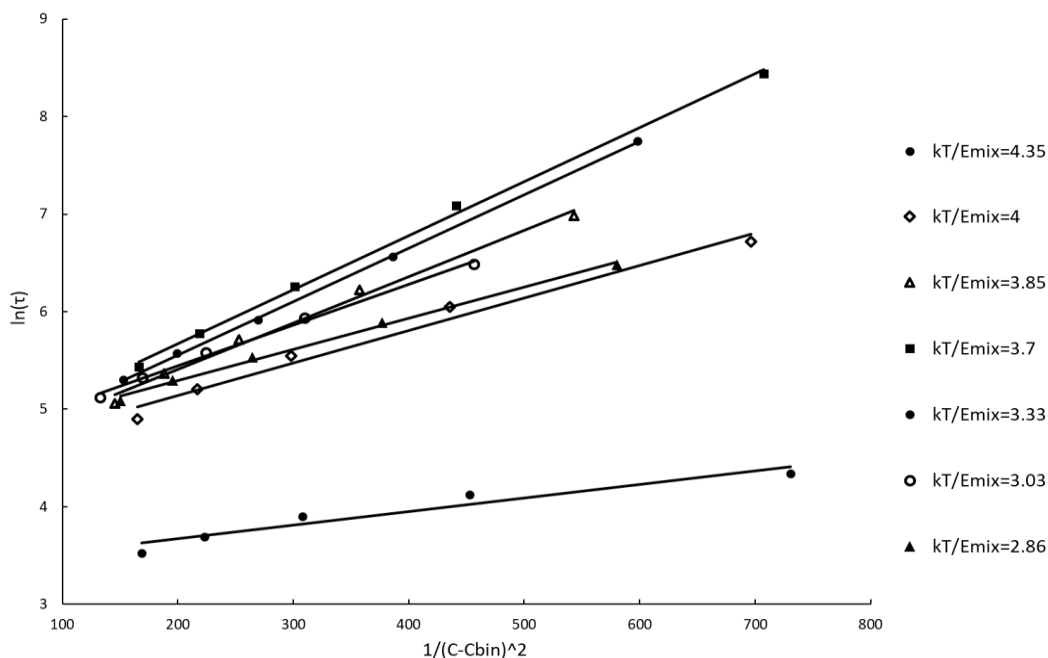


Рис. 1. Сімейство залежностей натурального логарифма інкубаційного часу від оберненого квадрату пересичення за різних зведених температур.

2. Комп'ютерний експеримент Монте-Карло показує, що логарифм інкубаційного часу впорядкованого сплаву $L1_2$ квадратично збільшується зі збільшенням відхилення концентрації від стехіометрії. При цьому коефіцієнт квадратичної залежності інкубаційного

часу від відхилення концентрації від стехіометрії лінійно зменшується з ростом переохолодження, принаймні, в дослідженому інтервалі температур.

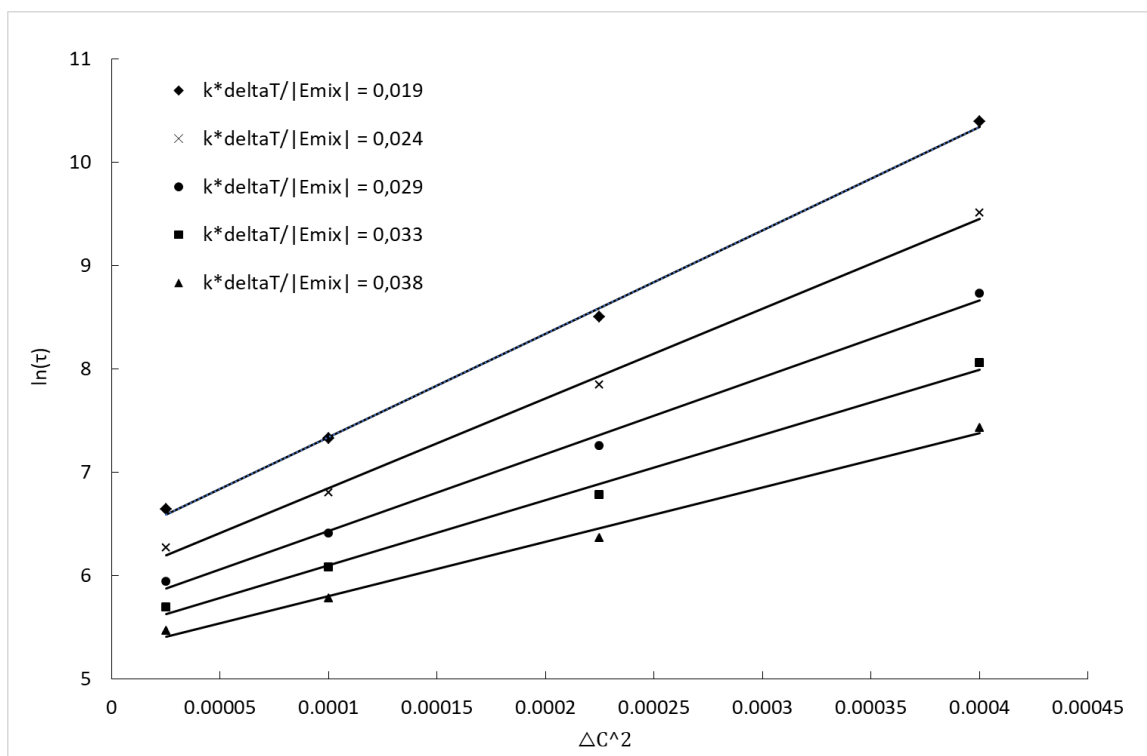


Рис. 2. Сімейство залежностей. натурального логарифма інкубаційного часу τ впорядкованої фази A_3B від квадрату відхилення концентрації від стехіометрії ΔC при різних переохолодженнях.

Список використаної літератури:

1. Kelton K. Nucleation in condensed matter: applications in materials and biology / K. Kelton, A. L. Greer // Elsevier. – 2010. – V. 15.
2. Schmelzer J. W. P. Nucleation theory and applications / J. W. Schmelzer // John Wiley & Sons. – 2006.
3. Soisson F. Monte Carlo simulations of the decomposition of metastable solid solutions: Transient and steady-state nucleation kinetics / F. Soisson, G. Martin // Physical Review B. – 2000. – V. 62, № 1. – P. 203.
4. Bezpalcuk V. Tracer Diffusion and Ordering in FCC Structures-Stochastic Kinetic Mean-Field Method vs. Kinetic Monte Carlo. In Defect and Diffusion Forum / V. Bezpalcuk, R. Abdank-Kozubski, M. Pasichnyy, A. Gusak // Trans Tech Publications. – 2018. – V. 383. – P. 59-65.
5. Gusak A. M. Kinetics of nucleation in the concentration gradient / A. M. Gusak, F. Hodaj, A. O. Bogatyrev // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2001. – V. 13, №. 12. – P. 2767.

Науковий керівник: доктор фіз.-мат. наук, професор Гусак А. М.

М.О. Краснюк

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

ВПЛИВ ТОВЩИНИ ПРОШАРКУ НІКЕЛЮНА ШВИДКІСТЬ РОСТУ ФАЗ Cu_3Sn + Cu_6Sn_5 У СИСТЕМІ $Cu-Sn$.

Оскільки основним провідником в мікросхемах є мідь, а матеріалом який з'єднує мідь з іншими невід'ємними деталями мікросхеми олово, то дослідження реакційної дифузії на межі системи $Cu-Sn$ є актуальною проблемою досліджень. В процесі експлуатації на межі вище вказаних компонент із різних причин, дифузійним шляхом виникають фази Cu_3Sn та Cu_6Sn_5 , які впливають на електричні та механічні властивості контакту. Також ріст фаз