

**РАСШИРЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОСТИ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ
ДЛЯ МД-МОДЕЛИРОВАНИЯ СВ-СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ
В НАНОСИСТЕМАХ Ni-AL И Ti-AL**

Шмаков Игорь Александрович

старший преподаватель

*кафедры вычислительной техники и электроники,
ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет»*

Барнаул, Россия

E-mail: ihammers.sia@gmail.com

SPIN: 1880-5218

Предметом исследования: методические и функциональные возможности специализированных программных пакетов свободного доступа LAMMPS и OVITO и авторских программ, используемых для моделирования микрокинетики СВС в гетерогенных системах.

Цель исследования: повышение информативности 3D-визуализации, адекватной интерпретации процессов структурно-фазовых превращений на границах раздела слоистых, слоисто-блочных наноразмерных систем Ni-Al и Ti-Al.

Методы и объекты исследования: методом молекулярно-динамического моделирования (МД-моделирования), реализованным в основе программного пакета LAMMPS, моделируется процесс инициирования и распространения волны горения СВС в исследуемых системах, а с помощью пакета OVITO осуществляется 3D-визуализация процессов диффузии, растворения и движения фронта волны горения СВС.

Основные результаты исследования: показано, что разработка автором программных модулей для расчета одномерных профилей температуры и плотности синтезируемого материала вдоль направления движения волны горения, а также для расчета и визуализации 3D-структуры распределения синтезируемых интерметаллидных прослоек на границе раздела в наночастицах со структурой Ni-Al «ядро-оболочка» (и аналогично для Ti-Al) позволяет, в отличие пакета OVITO, обнаруживать гетерофазные интерметаллидные структуры в таких системах. В результате проведения большой серии вычислительных экспериментов по моделированию микрокинетики в исследуемых наноразмерных системах Ni-Al и Ti-Al установлено, что созданный автором с поддержкой параллельных вычислений комплекс программ (ПО), в составе которого кроме лицензионных пакетов LAMMPS и OVITO интегрированы авторские программные модули, обладает новыми более широкими функциональными возможностями в методологическом аспекте исследования проблем физико-химии процесса СВС и является ярким примером созданного инструментария программной инженерии в этой области исследования.

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование (МД-моделирование), вычислительные эксперименты, параллельные вычисления, 3D-визуализация, программные пакеты свободного доступа LAMMPS и OVITO, микрокинетика СВС, интерметаллиды, тонкие пленки, структурно-фазовые превращения, гетерофазные структуры, наночастицы Ni-Al и Ti-Al со структурой «ядро-оболочка».

**EXTENSION OF THE FUNCTIONALITY OF THE SOFTWARE FOR MD-SIMULATION
OF THE SH-SYNTHESIS OF INTERMETALLIDES
IN NI-AL AND TI-AL NANOSYSTEMS**

Igor A. Shmakov

Senior Lecturer of the Department
of Computer Engineering and Electronics,
Altai State University,
Barnaul, Russia
E-mail: ihammers.sia@gmail.com
SPIN: 1880-5218

The subject of research: the methodological and functional capabilities of specialized software packages of free access LAMMPS and OVITO and author's programs used for simulation of SHS-microkinetics in heterogeneous systems.

Purpose of research: to increase information content, 3D-visualization, and adequate interpretation of the processes of structural-phase transformations at interfaces of the layered, layered-block nanoscale Ni-Al and Ti-Al systems.

Methods and objects of research: the molecular dynamics simulation method implemented in the basis of the LAMMPS software package simulates the process of initiation and propagation of the SHS combustion wave in the systems under study, and using the OVITO package, 3D-visualization of the processes of dissolution, diffusion, and motion of the SHS combustion wave front is carried out.

Main results of research: it is shown that the development by the author of software modules for calculating one-dimensional temperature and density profiles of the synthesized material along the direction of combustion wave motion, as well as for calculating and visualizing the 3D-structure of the distribution of synthesized intermetallic interlayers at the interface in nanoparticles with the Ni-Al "core-shell" structure (and similarly for Ti-Al) allows, in contrast to the OVITO package, to detect heterophase intermetallic structures in such systems. As a result of a large series of computational experiments on simulation of microkinetics in the studied nanoscale Ni-Al and Ti-Al systems, it has been established that the software package created by the author with support for parallel computing, which, in addition to the licensed packages LAMMPS and OVITO, integrates author's software modules, has new broader functionality in the methodological aspect of the study of the problems of physical chemistry of the SHS process and is a vivid example of the created software engineering tools in this area of research.

Keywords: molecular dynamics simulation (MD-simulation), computational experiments, parallel computing, 3D-visualization, free access software packages LAMMPS and OVITO, SHS microkinetics, intermetallic compounds, thin films, structural-phase transformations, heterophase structures, Ni-Al and Ti-Al nanoparticles with the structure "core-shell".

Введение

Сплавы и суперсплавы на основе алюминидов никеля и титана, характеризующиеся высокой коррозионной стойкостью и механической прочностью при высоких температурах, нашли широкое применение в современном машиностроении, в частности, в турбинах и секциях сгорания двигателя [1]. Например, доля от общей массы авиационного двигателя, которая приходится на такие суперсплавы, традиционно достигает 50%. Одним из методов получения интерметаллических соединений является «самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС)».

СВС как метод создания новых соединений и композиционных материалов с уникальными свойствами и характеристиками представляет собой процесс распространения волны горения по смеси реагентов (в результате экзотермической химической реакции во фронте волны горения) с большим выделением тепловой энергии, в котором происходит синтез материалов в виде твердых конечных продуктов [2]. Инициирование процесса «зажигания» смеси реагентов обычно производят на ее поверхности воздействием кратковременного теплового импульса с длительностью до одной секунды, например, с помощью электрической спирали, электроискрового разряда, лазерного луча и др.

Распространение волны горения по смеси реагентов считается первой (основной) стадией СВС. Вторую стадию СВС определяют вторичные физико-химические превращения. На состав и структуру конечных продуктов с разнообразием микро-, мезо- и макроструктур различного масштаба гетерогенности оказывают влияние следующие факторы: пористость и температура смеси реагентов, их дисперсность и стехиометрическое начальное соотношение, степень разбавления смеси инертными добавками, тепловые потери во внешнюю среду, устойчивость движения фронта волны горения и др.

Взаимовлияние элементарных процессов, происходящих в реакционной среде на различных уровнях иерархии ее гетерогенности, формирует поведение волны горения на макроскопическом уровне, а микрогетерогенная структура волны горения проявляется в структуре «микроочагов» горения и в значительной степени определяет режим устойчивости горения (либо дискретный распад тепловой структуры волны горения).

Исследования микрокинетики горения, фазо- и структурообразования в процессе СВС при проведении физических экспериментов требует значительных финансово-материальных и временных затрат [15], а методы компьютерного моделирования позволяют проводить значительно большее количество вычислительных экспериментов (ВЭ), а также более целенаправленно и предсказуемо проводить такие исследования.

Цель работы – разработка комплекса программ, предназначенного для МД-моделирования микрокинетики СВС в гетерогенных наноразмерных бинарных системах (например, Ni-Al и Ti-Al), обеспечивающего более широкие функциональные возможности в методологическом аспекте исследования проблем физико-химии процесса СВС по сравнению с программными пакетами свободного доступа LAMMPS и OVITO, применяемыми для МД-моделирования СВС. Расширение функциональности нацелено на повышение информативности, 3D-визуализации, адекватной интерпретации процессов структурно-фазовых превращений на границах раздела слоистых, слоисто-блочных наноразмерных систем Ni-Al и Ti-Al.

Результаты и обсуждение

Методологические и функциональные возможности лицензионных программных пакетов LAMMPS и OVITO, используемых для моделирования и визуализации СВС в наносистемах

Достаточно эффективным методом исследования эволюции атомных систем, содержащих в своем составе до нескольких миллионов атомов, в условиях температурно-силового воздействия на них является метод «молекулярной динамики» (МД), а одним из наиболее эффективных вариантов его программной реализации является программный пакет LAMMPS свободного доступа.

Метод МД, использующий потенциал межатомного взаимодействия, например, модель «погруженного атома» (англ., embedded atom model – EAM), достаточно реалистично имитирует взаимодействие между атомами в исследуемой атомной системе, вследствие чего во времени у атомов изменяются пространственные координаты, их скорости. Следовательно, в атомной системе изменяется энергия, температура и давление, т.е., наряду с изменением микроскопических параметров частиц изменяются и макроскопические параметры атомной системы в целом. Равновесные ее состояния (условия), в которых некоторые макропараметры системы сохраняют свои значения, в статистической механике связаны с условиями канонических ансамблей термодинамики NVT , NVE , NPT , где N – число атомов, V – объем, T – температура, P – давление. Вычислительная процедура МД-метода рассчитывает траек-

тории частиц интегрированием уравнений движения (уравнений Ньютона), с помощью многошагового алгоритма Верле [3, 4].

В процессе распространения экзотермической волны горения СВС, т.е. в условиях температурно-силовых воздействий на атомы, возникают всплески высокого давления, внутренние дефекты и дислокации в локальных структурах атомной системы. Поэтому к точности многочастичного потенциала межатомного взаимодействия предъявляются жесткие требования в аспекте моделирования энергетических и структурных превращений, происходящих в процессе распространения волны горения СВС по смеси реагентов. Этим требованиям при изучении микрокинетики СВС в наносистемах Ni-Al и Ti-Al удовлетворяют две разновидности EAM-потенциала [5, 6], их соответствующие загружаемые файлы используются в процессе работы пакета LAMMPS.

Версия LAMMPS, распространяемая по лицензии GPL, написанная на C++ с интерфейсом передачи сообщений MPI и доступная в виде исходных кодов, позволяет выполнять параллельные вычисления и значительно ускорить большой объем вычислений при симуляции исследуемых процессов [7]. Для запуска симуляции в пакете LAMMPS с помощью входного «конфигурационного» файла config.txt, предварительно создаваемого исследователем, реализуется построение атомной системы, назначение потенциалов и настройки процедур моделирования с последующим имитационным моделированием самого процесса СВС.

В качестве достоинства и особенностей пакета LAMMPS можно указать на то, что для исследуемой системы имеется возможность анализа текущего состояния атомной конфигурации, выгрузку которой можно производить как в текстовый, так и в бинарный файлы. Начальная конфигурация атомов, используемая для дальнейших расчетов, может быть сгенерирована как в программе, так и загружена из бинарного/текстового файла. При использовании режима параллельных вычислений можно применить разделение (декомпозицию) «3D-домена моделирования», например, 3D-параллелепипеда на небольшие 3D-поддомены, каждый из которых назначается отдельному процессору. Процессоры обмениваются информацией и хранят информацию об атомах, содержащихся в их поддоменах для тех атомов, которые находятся в соседних поддоменах.

В конце каждого временного шага моделирования в качестве результатов пакета LAMMPS на внешнем диске сохраняется очередной выходной файл Res_i.dat ($i=1, 2, 3, \dots, M$), который содержит записи выходных данных по каждому из N атомов системы в формате: тип атома (Ni либо Ti либо Al); координаты атома (x, y, z); скорости атома (v_x, v_y, v_z); действующие на атом силы (f_x, f_y, f_z); E_a – кинетическая энергия атома.

Для построения изображений с распределением атомов и типов структур, соответствующих элементарным ячейкам (ГЦК, ОЦК, ГПУ и т.д.), используется программа OVITO [8, 9], в которой также применяется пространственная декомпозиция на поддомены. Для рендеринга (отрисовки или визуализации) можно использовать несколько способов трассировки лучей, реализованных в компонентах: OpenGL, Tachyon, OSPRay и POV-Ray, которые можно включать (либо отключать) в конфигурацию программы OVITO. В данной работе использовался компонент Tachyon, основанный на Tachyon Parallel/Multiprocessor Ray Tracing System. Данный вид трассировки лучей позволяет использовать все потоки, которые могут генерироваться в вычислительной системе (компьютере с многоядерным процессором) для рендеринга конечного изображения.

Методика МД-моделирования СВС в наносистемах с различной структурой

Примеры исходных слоистых, слоисто-блочных наносистем Ti-Al в виде схематических структур, которые строятся с использованием пакета LAMMPS, показаны на рисунках 1 и 2 (аналогичные структуры создавались и для Ni-Al).

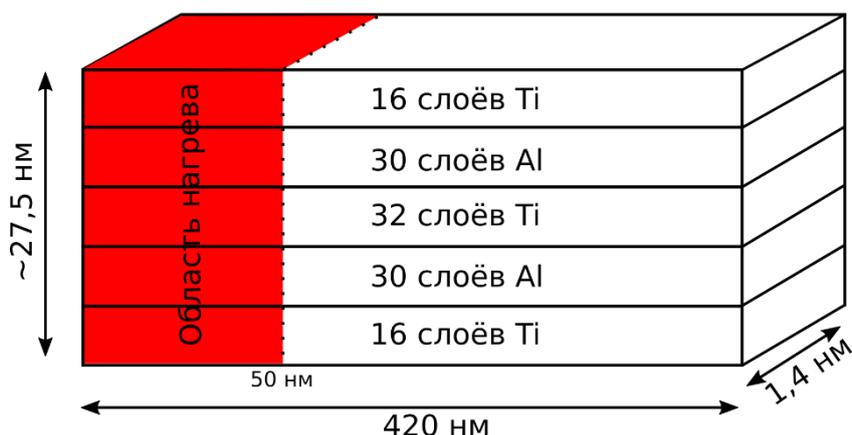


Рисунок 1 – Структура слоистой атомной наносистемы Ti-Al [Том 3, №1]

На рисунке 1 показано пять чередующихся «крупных» слоев кристаллических решеток из атомов Ti и Al, в которых крайние (верхний и нижний) «крупные» слои содержат по 16 атомных плоскостей (слоев) Ti, т.е. их толщина составляет половину толщины центрального «крупного» слоя Ti. Два «крупных» слоя из атомов Al содержат по 30 атомных плоскостей (слоев) Al.

В слоисто-блочной «шахматно-подобной» структуре (рис. 2) крайние «крупные» слои по толщине также в 2 раза меньше 3-х центральных «крупных» слоев. Блоки из атомов Ti и Al немного различаются по количеству в них атомных плоскостей, так как размеры элементарных ячеек для Ti и Al отличаются друг от друга. В каждом крупном слое находится по 12 блоков длиной в 35 нм. На обоих рисунках в пределах 50 нм (по длине) показаны зоны «зажигания» процесса СВС (зоны нагрева до температуры воспламенения).

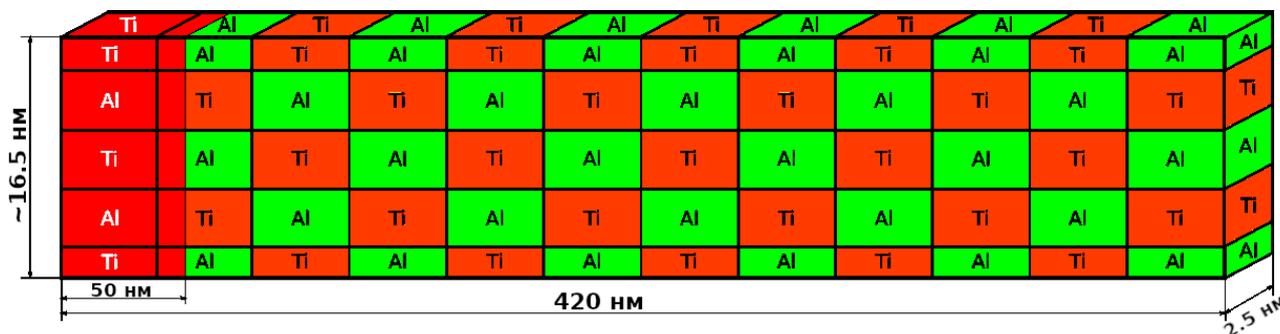


Рисунок 2 – Структура слоисто-блочной атомной наносистемы Ti-Al

Схематичное изображение (в перспективе) для кубических наночастиц со структурой Ti-Al и Ni-Al «ядро-оболочка» показано на рисунке 3.

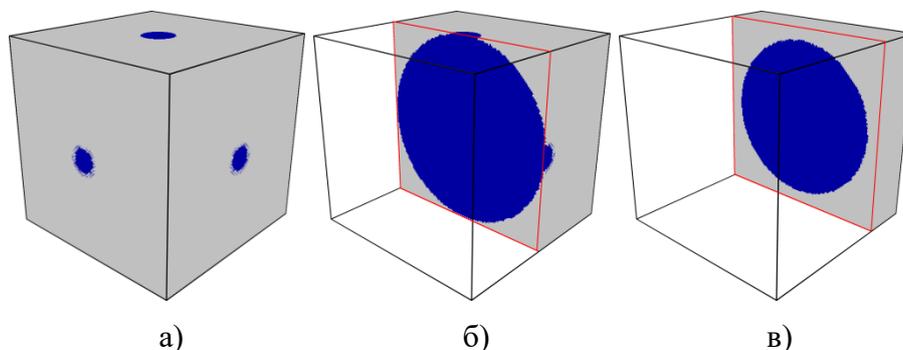


Рисунок 3 – Схематичное изображение (в разрезе) для наночастиц со структурой «ядро-оболочка»: а – полный объем; б – половина объема; в – четверть объема

Атомная структура кубической наночастицы построена с помощью пакета LAMMPS. Размер куба и диаметр Ti-ядра (либо Ni-ядра) практически совпадают и равны 25 нм. В центрах всех шести граней куба (рис. 3а, б) наблюдаются одинаковые круги с «ореолами» кольцевой формы – это атомы Ti (в другом случае атомы Ni).

Согласно методике проведения вычислительных экспериментов (ВЭ) при построении атомной системы (рис. 1, 2 и 3) каждый из «крупных» слоев (либо блоков) представлял собой пакет определенного числа атомных плоскостей в виде кристаллической решетки с элементарными ячейками: решетки из атомов Ni и Al составлялись из гранецентрированных кубических ячеек (ГЦК-тип, fcc – англ. аббр.). Значения параметра a кубических ячеек металлов Ni и Al различаются: $a=0.3524$ нм – для Ni, и $a=0.405$ нм – для Al [5]. Ячейки атомов Ti соответствуют структуре гексагональной плотной упаковки ячеек (ГПУ-тип, hcp – англ. аббр.). ГПУ-ячейки характеризуются параметрами: $a = 0.29508$ нм и $c = 0.46855$ нм ($c/a = 1.5879$) [6]. Стехиометрическое соотношение компонентов выражается отношением числа атомов Ni (либо Ti) к числу атомов Al.

В начале вычислительного эксперимента (на 1-ом этапе) исследуемая наносистема во всем своем объеме однородно прогревалась в течение 0.4 нс при начальной температуре T_0 (например, 600 К, либо 700 К, либо 800 К). При этом происходила «релаксация» структуры атомной системы с фиксированными термодинамическими параметрами: N – число всех атомов в структуре, $P=1$ Бар – внешнее давление, температура T_0 (NPT-ансамбль). Кроме того, на данном этапе по всем 3-м измерениям для исследуемой атомной структуры фиксировались периодические граничные условия.

На 2-ом этапе в течение 0.1 нс в пределах 50 нм (как показано на рис. 1 и 2) производился прогрев, начиная с T_0 и до T_{ign} (например, до 1200 К, либо 1300 К, либо 1400 К), с сохранением периодических граничных условий для всей структуры наносистемы. Через T_{ign} обозначена температура зажигания (англ., ignition). Зажигание СВС в пределах 50 нм осуществляется в условиях NVT-ансамбля (V – объем зоны прогрева), а в оставшейся части объема (в пределах от 50 и до 420 нм) в течение этих же 0.1 нс соблюдаются условия NVE-ансамбля (E – суммарная энергия атомов наносистемы). По истечении 0.1 нс в структуре фиксируются «свободные» граничные условия вдоль оси X (вдоль направления волны горения на протяжении 420 нм). По отношению к направлению оси Y (протяженностью 1.4 нм – на рисунке 1, либо 2.5 нм – на рисунке 2) и оси Z (высота структур) сохраняются периодические условия. При соблюдении для всей структуры условий NVE-ансамбля в начальной зоне инициируется процесс СВС с дальнейшим распространением волны горения вдоль направления оси X.

Для таких (рис. 1, 2 и 3) и многих подобных примеров атомных наносистем были получены результаты моделирования режима микрогетерогенного горения в процессе СВС на основе цикла выполненных ВЭ с помощью пакета LAMMPS. Соответствующие i -ым моментам времени выходные файлы Res_i.dat ($i=1, 2, 3, \dots, M$), как уже упоминалось выше, сохранялись на внешнем диске, которые содержат записи выходных данных по каждому из N атомов системы в формате: тип атома (Ni либо Ti, либо Al); координаты атома (x, y, z); скорости атома (v_x, v_y, v_z); действующие на атом силы (f_x, f_y, f_z); E_a – кинетическая энергия атома.

Используя функциональные возможности пакета OVITO, можно анализировать во времени процессы диффузии, растворения и движения фронта волны горения СВС, например, как показано на рисунке 4 для слоисто-блочной структуры (СБС) наносистемы Ti-Al в центральном вертикальном сечении (в плоскости XZ с координатой $Y=1.25$ нм).

Как видно из рисунка 4, волна горения проходит 420 нм приблизительно за 25 нс (осредненная скорость движения фронта горения порядка 17 м/с), но даже к концу 32 нс не все блоки Ti до конца растворились (стехиометрическое соотношение числа атомов Ti к числу атомов Al равно $N_{\text{Ti}}/N_{\text{Al}}=1.242$).

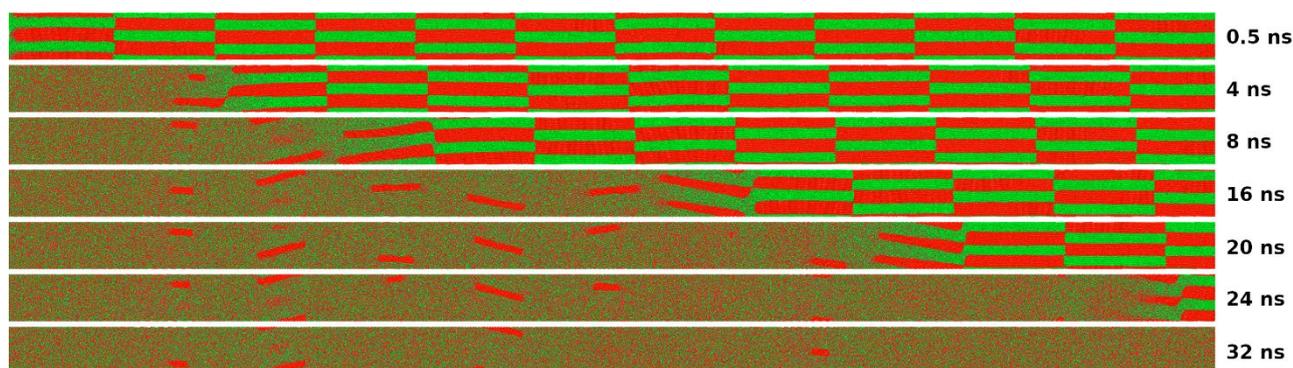


Рисунок 4 – Снимки с распределением атомов Ti (красные точки) и атомов Al (зеленые точки) в сечении СВС, соответствующие последовательным моментам времени продвижения волны горения. В случае преобразования цветовых оттенков в градации «серости» красный цвет перейдет в «темно-серый»; зеленый – в «светло-серый»

Кроме того, включая в инструментах пакета OVITO модификатор “Ackland-Jones analysis”, имеется возможность анализировать распределение атомов по типам структур элементарных ячеек (ГЦК, ОЦК, ГПУ и др.), чтобы предсказывать образование интерметаллических соединений в процессе СВС (однако не во всех случаях это удастся сделать). Как видно из рисунка 5 (для той же наносистемы Ti-Al со стехиометрией 1.242), дополнительно к анализу рисунка 4 здесь можно отметить возникновение устойчивого образования гетерофазных интерметаллидных структур (ГИС) с резкими границами. Внутри ГИС выделяются «прожилки» красного цвета, соответствующие ГПУ-типу. Сопоставляя их с остатками не полностью растворенного Ti (согласно рисунку 4), можно сказать, что оставшаяся часть в ГПУ-прожилках может представлять только интерметаллид Ti_3Al . Доминирование в ГИС зеленых точек, соответствующих ГЦК-фсс-типу, указывает на образование интерметаллида TiAl. Вне ГИС наблюдается «смесь» цветов, поэтому говорить о каких-либо «гомогенных» областях интерметаллических соединений не приходится.

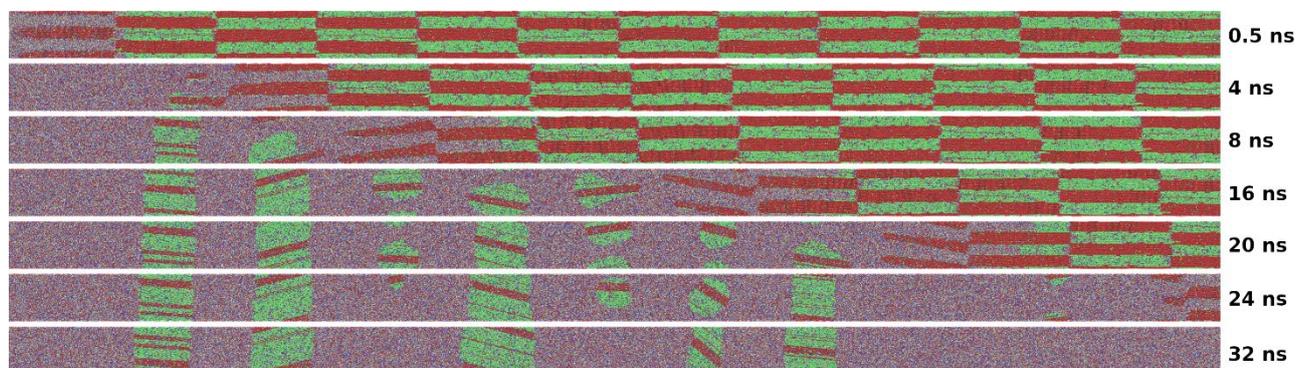


Рисунок 5 – Снимки с распределением различных типов элементарных ячеек (ГЦК, ОЦК, ГПУ и др.) в сечении СВС в последовательные моменты времени: зеленые точки – ГЦК-фсс тип; синие точки – ОЦК-бсс тип; красные точки – ГПУ-гср тип; желтые точки – fcc тип; белые точки – «другие» типы. В случае преобразования цветовых оттенков в градации «серости» красный и синий цвета перейдут в «темно-серый»; зеленый – в «светло-серый»

Резюмируя сведения о достоинствах пакета OVITO при анализе результатов МД-моделирования СВС, можно утверждать, что полную «картину» термического и микроструктурного анализа продуктов реакции СВС возможности пакета OVITO не обеспечивают. В этом можно убедиться, проанализировав ниже изложенное, что и послужило толчком (мотивацией) для разработки дополнительных методов и программных средств для анализа результатов моделирования процесса СВС.

Расширение функциональности ПО для МД-моделирования СВС в наносистемах с помощью специальных программных модулей

Для выполнения термического и микроструктурного анализов, используя данные о кинетической энергии и координатах каждого атома наносистемы, рассчитываемых пакетом LAMMPS в процессе моделирования СВС (данные из файлов Res_i.dat), были разработаны алгоритмы расчета профилей температуры и плотности синтезируемого материала вдоль направления распространения волны горения [10, 11]. На основе алгоритмов расчета профилей был создан соответствующий им программный модуль T&P-profiles.exe с использованием GCC-компилятора языка программирования C/C++.

Для ускорения расчетов двух наборов профилей (по два профиля для каждого момента времени) была использована утилита командной строки GNU parallel в качестве программной оболочки под управлением ОС GNU/Linux для параллельного выполнения однотипных заданий обработки блоков данных одинакового размера, но с различными значениями в них, т. е. для параллельного выполнения набора SIMD-задач. В памяти вычислительного кластера создается необходимое количество копий файла T&P-profiles.exe, и система GNU parallel с помощью загруженных в нее файлов Res_i.dat параллельно рассчитывает наборы профилей температуры и плотности (см. рис. 6 и 7).

Для распознавания пространственного 3D-распределения синтезированных интерметаллидных прослоек на границе раздела наночастиц со структурой Ni-Al «ядро-оболочка» был разработан соответствующий метод распознавания и программный модуль «3D-intermetallide_recognition_in_Ni-Al_system» [12, 14]. Этот метод использует предварительно рассчитанные данные о 3D-распределениях температуры и плотности вещества по объему наночастицы Ni-Al «ядро-оболочка» (по результатам работы пакета LAMMPS из файлов Res_i.dat), а также структурную информацию о гомогенных и двухфазных областях синтезируемых интерметаллидов, извлекаемую из равновесной диаграммы состояния системы Ni-Al. Для распознавания пространственного 3D-распределения синтезированных интерметаллидных прослоек на границе раздела наночастиц со структурой Ti-Al «ядро-оболочка» был использован аналогичный подход (как и для наночастиц со структурой Ni-Al «ядро-оболочка»). Однако соответствующие алгоритмы и программные модули для подобных между собой структур Ni-Al и Ti-Al имеют существенные различия, так как структуры информации о гомогенных и двухфазных областях синтезируемых интерметаллидов для двух систем Ni-Al и Ti-Al существенно отличаются друг от друга, что выражается в различии условий и критериев распознавания тех или других интерметаллидов.

Для реализации 3D-распознавания весь объем кубической наночастицы разбивается по трем измерениям на достаточно малые объемы в виде кубиков, например, с размерами 1.25x1.25x1.25 нм. Т. е., по каждому из трех измерений насчитывается по 20 кубиков, так как ребро кубической наночастицы равно 25 нм. Общее количество кубиков равно $8000=20 \times 20 \times 20$. С помощью трехмерного вложенного цикла в каждом кубике определяются количества атомов Ni и Al (во втором случае, Ti и Al) с последующим вычислением общей массы атомов в каждом кубике. Поделив на один и тот же объем кубика (1.953125 нм^3) общие массы атомов в кубиках, получаем набор значений плотности вещества по всем кубикам для заданного момента времени (аналогично и для других моментов времени).

Используя из файлов Res_i.dat данные о кинетической энергии каждого атома, аналогичными циклами определяются распределения внутренних энергий по всем кубикам, через которые пересчитываются распределения температур.

Распознавание интерметаллидов производится также в процессе выполнения трехмерного вложенного цикла с использованием рассчитанных распределений температур и плотностей по кубикам, а также с учетом информации о гомогенных и двухфазных областях синтезируемых интерметаллидов, извлекаемой из равновесной диаграммы состояния систем Ni-Al и Ti-Al. Алгоритмические подробности изложены в [12, 13, 14].

Демонстрация и обсуждение результатов моделирования микрокинетики СВС на основе дополнительных программных модулей

В алгоритмах расчета профилей температуры и плотности синтезируемого материала (по сути, одномерных распределений) используется разбиение вдоль оси распространения волны горения (т. е. вдоль оси X с ее предельным значением 420 нм) с малым шагом 4 нм всего объема СВС на домены (параллелепипеды), в каждом из которых оцениваются осредненные температуры и плотности вещества. Соответствующие размеры всех доменов одинаковы (4x2.5x16.5 нм). Таким образом, в каждом профиле обеспечено по 105 отсчетов (см. рис. 6 и 7).

Как видно из рисунка 6, скорость движения фронта волны горения (отношение перемещения фронта ко времени этого перемещения) по ходу распространения волны изменяется (увеличивается). Т.е., определяя расстояние и время перемещения между «соседними» профилями, их отношение (скорость фронта) увеличивается приблизительно от 13 м/с (в пределах первых 12 нс) и до 22 м/с (от 12 до 24 нс). Т. о., можно сделать вывод, что наблюдается режим «разгона» волны горения. В конечной зоне СВС (координата X в диапазоне 400-420 нм) с течением времени температура медленно повышается (не остается начальной 800 К), поэтому в конечной стадии распространения волны горения происходит «зажигание» СВС в этой конечной зоне СВС без дополнительного внешнего источника нагрева.

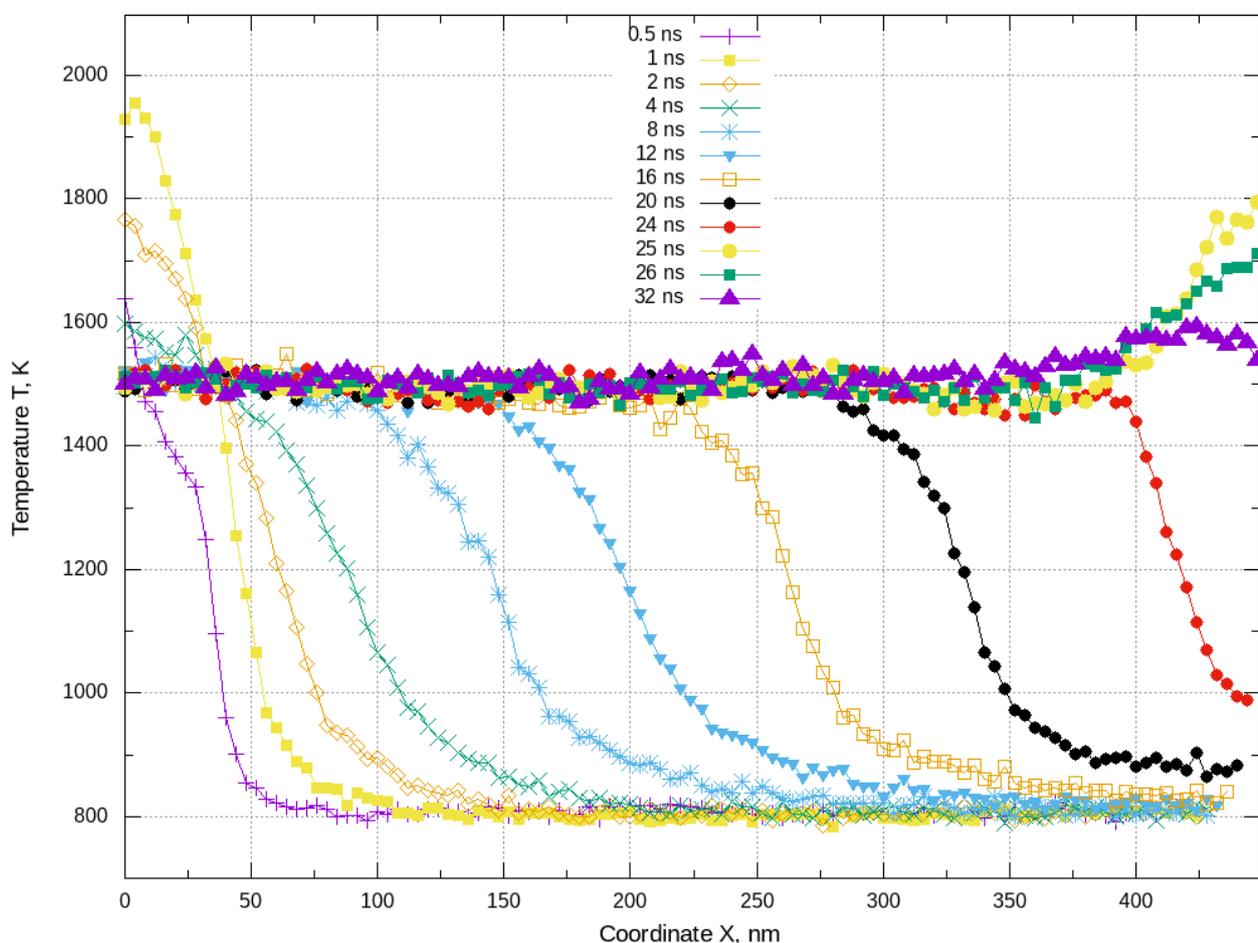


Рисунок 6 – Набор температурных профилей, соответствующих последовательности моментов времени при распространении волны горения в слоисто-блочной системе Ti-Al

К 25 нс волна горения достигает конечной зоны СВС и на последнем профиле плотности (маркеры 32 нс, рис. 7) наблюдаются пять «пиков» плотности, соответствующих расположению гетерофазных структур на рисунке 5. Отметим тот факт, что «эффективная» ширина пиков плотности (порядка 25 нм) практически совпадает с шириной гетерофазных интерметаллидных

структур (согласно рисунку 5), т. е. согласуются результаты относительно гетерофазных структур, полученные двумя разными методами (визуализация OVITO и профили плотности).

Дополнительно отметим, что значение пиков плотности близко к значению 3.6 г/см^3 , которое при температурах порядка 1500 К соответствует плотности интерметаллида TiAl, тем самым с помощью разработанных алгоритмов и программного модуля T&P-profiles.exe реализована возможность распознавать гомогенные области интерметаллических фаз по диапазонам плотности фаз (вдоль одного измерения X).

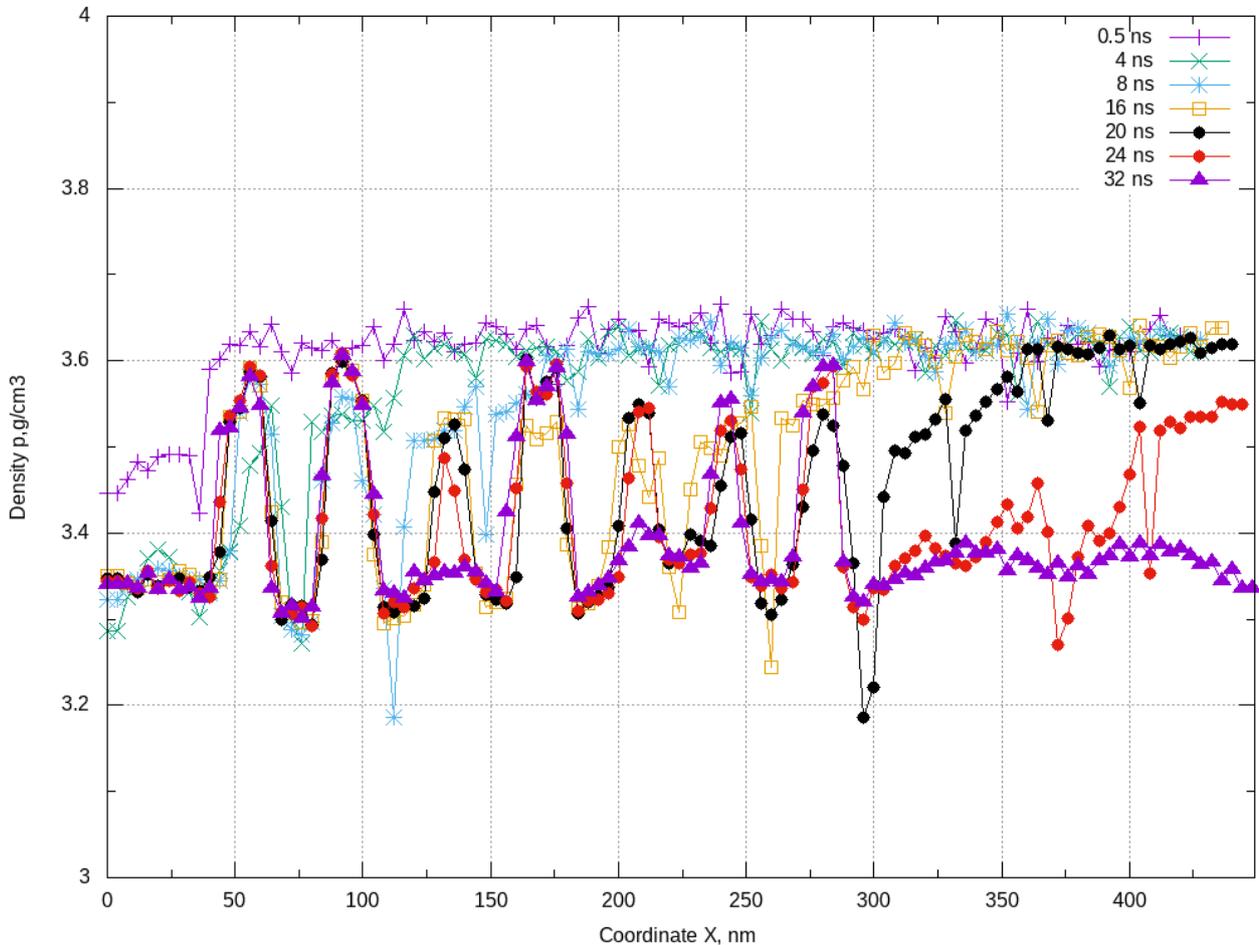
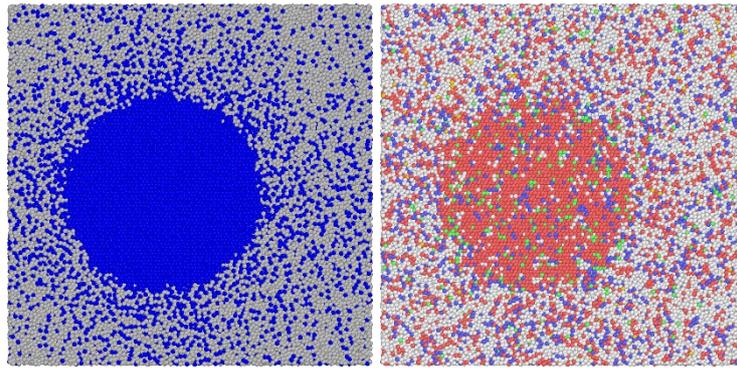


Рисунок 7 – Набор профилей плотности синтезируемого материала, соответствующих последовательности моментов времени при распространении волны горения в слоисто-блочной системе Ti-Al

В качестве результатов распознавания пространственного 3D-распределения синтезированных интерметаллидных прослоек на границе раздела наночастиц со структурой Ti-Al «ядро-оболочка» на рисунке 8 (фрагмент в) отражена одна 2D-карта распределения фаз из 20 карт (соответствующих 20-и вертикальным слоям-сечениям по 400 кубиков), составляющих вместе общее 3D-распределение интерметаллидных прослоек в кубической наночастице со структурой Ti@Al «ядро-оболочка». Отраженный на рисунке 8 (фрагмент в) слой с номером $N_x=17$ расположен практически близко к конечному 20-у слою, до которого доходит волна горения приблизительно при завершении 1-ой наносекунды, но процесс фазо- и структурообразования продолжается и далее (и за пределами 2 нс).



а)

б)



в)

Рисунок 8 – Различные распределения в слое $N_x=17$, $\tau=2.0$ ns:

а – распределение атомов Ti и Al (с помощью OVITO);

б – распределение типов кристаллических структур (с помощью OVITO):

зеленые точки – fcc, синие точки – bcc, красные точки – hcp,

желтые точки – ico type; белые точки – «другой» тип;

в – карта распределения фаз: 1 и 2 – соответственно, α -Ti и β -Ti; 3 – Ti_3Al ; 4 – TiAl;

5 – $TiAl_2$; 6 – $TiAl_3$; 7 – Al; 10 – жидкий Al (или 7L);

другие обозначения – для двухфазных областей

На карте распределения фаз (рис. 8, фрагмент в) кроме фаз с номерами от 1 до 7 и 10 наблюдаются двухфазные области (например, «1;4» – смесь твердых фаз α -Ti и фазы TiAl;

«6+7L» – смесь твердой фазы $TiAl_3$ с жидким Al; «2L<7L» – смесь двух жидких фаз Ti и Al с преобладанием жидкого Al).

Результаты визуализации, полученные программой OVITO, отображены на рисунке 8 (фрагменты *a* и *б*). В центре фрагментов 8*a* и 8*б* отчетливо выделяется Ti-ядро. Геометрические формы и размеры Ti-ядра на всех фрагментах (*a*, *б*, *в*) практически совпадают и подобно расположены. Распределение интерметаллических фаз с номерами 3, 4, 5, 6 в виде сферических слоев (либо других структур) по фрагментам (*a*, *б*) рисунка 8 практически установить невозможно. Применяя предложенный метод 3D-распознавания интерметаллических фаз [12, 13, 14], на фрагменте 8*в* отчетливо распознаются сферические прослойки фаз 3, 4, 5, 6 (фаза 6 особенно выделяется). Поэтому пакет OVITO со встроенным Ackland-Jones анализом (другими словами, Bond-angle analysis – анализ по углу и длине связи) имеет ограничения по распознаванию интерметаллидов в структурах «ядро-оболочка».

Заключение и выводы

В результате проведения серии вычислительных экспериментов по моделированию микрокинетики СВС в слоистых и слоисто-блочных структурах наносистем Ni-Al и Ti-Al, а также в наночастицах со структурой Ni-Al и Ti-Al «ядро-оболочка» выяснилось, что функциональных возможностей программных пакетов LAMMPS и OVITO не достаточно для проведения полного и глубокого анализа процессов структурно-фазовых превращений в исследуемых наносистемах в ходе реакции СВС.

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

1. Разработанный программный модуль для расчета одномерных профилей температуры и плотности синтезируемого материала вдоль направления движения волны горения позволяет обнаруживать гетерофазные интерметаллидные структуры и уточнять в них, в отличие пакета OVITO, разновидности интерметаллических фаз.

2. Метод исследования процессов СВ-синтеза в наночастицах со структурой Ni-Al и Ti-Al «ядро-оболочка» позволяет, в отличие пакета OVITO, распознавать и визуализировать 3D-структуру распределения синтезируемых интерметаллидных прослоек на границе раздела наночастиц со структурой «ядро-оболочка».

3. Созданный комплекс программ (ПО), в составе которого кроме лицензионных пакетов LAMMPS и OVITO интегрированы авторские программные модули, обладает новыми более широкими функциональными возможностями в методологическом аспекте исследования проблем физико-химии процесса СВС и является ярким примером созданного инструментария программной инженерии.

Литература

1. Yvon, P. Structural materials challenges for advanced reactor systems / P. Yvon, F. Carré // *J. Nucl. Mater.* – 2009. – Vol. 385. – P. 217–222.
2. Мержанов, А. Г. Твердопламенное горение / А. Г. Мержанов, А. С. Мукасян. – 2-е издание. – Москва: ТПУС ПРЕСС, 2007. – 336 с. – ISBN 978-5-94588-053-5. – EDN ZARJPN. – Текст : непосредственный.
3. Verlet, L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules / L. Verlet // *Physical Review Journals.* – 1967. – Vol. 159. – P. 98.
4. Verlet, L. Computer «experiments» on classical fluids. II. Equilibrium correlation functions / L. Verlet // *Physical Review Journals.* – 1967. – Vol. 165. – P. 201.
5. Purja, P. G. P. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system / P. G. P. Purja, Y. Mishin // *Philosophical Magazine.* – 2009. – Vol. 89, № 34-36. – P. 3245–3267.
6. Zope R. R. Interatomic Potentials for Atomistic Simulations of the Ti-Al System / R. R. Zope, Y. Mishin // *Physical Review B.* – 2003. – Vol. 68. – P. 024102.

7. Plimpton, S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – Vol. 117. – P. 1–19.
8. Stukowski, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool / A. Stukowski // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2010. – Vol. 18. – P. 015012.
9. Ackland, G. J. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation / G. J. Ackland, A. P. Jones // *Physical Review B*. – 2006. – Vol. 73, № 5. – P. 054104.
10. Шмаков, И.А. Компьютерное моделирование СВ-синтеза алюминидов никеля методом молекулярной динамики в пакете LAMMPS с использованием параллельных вычислений / И. А. Шмаков, В. И. Иордан, И. Е. Соколова. – Текст : непосредственный // *Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии*. – 2018. – № 1(8). – С. 48–54.
11. Шмаков, И. А. Молекулярно-динамическое моделирование СВС в наноразмерной слоистой Ti-32.89wt%Al с использованием параллельных вычислений / И. А. Шмаков, В. И. Иордан, Т. М. Савичева. – Текст : непосредственный // *Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии*. – 2019. – Т. 3, № 1. С. 77–81.
12. Иордан, В. И. Вычислительная процедура распознавания синтезируемых интерметаллических прослоек на границе раздела в наночастицах типа Ni-Al «ядро-оболочка» / В. И. Иордан, И. А. Шмаков. – Текст : непосредственный // *Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии*. – 2021. – Т. 5, № 2. – С. 42–52.
13. Jordan, V. I. 3D computer-aided simulation of SHS macrokinetics in the Ni-Al porous medium with the closest packing of «mesocells» / V. I. Jordan, I. A. Shmakov, A. A. Grigoryevskaya. – DOI 10.1088/1742-6596/1745/1/012062. – EDN VZSTHA // *Journal of Physics: Conference Series* : 6 (Samara, 26-29 may 2020). – Samara, 2021. – P. 012062.
14. Jordan, V. Method for Intermetallide Spatial 3D-Distribution Recognition in the Cubic Ni-Al «Core-shell» Nanoparticle Based on Computer MD-Simulation of SHS / V. Jordan, I. Shmakov. – DOI 10.1007/978-3-030-94141-3_9. – EDN EEWMVT // *Communications in Computer and Information Science*. – 2022. – Vol. 1526 CCIS. – P. 101–120.
15. Temperature measurements for Ni-Al and Ti-Al phase control in SHS synthesis and plasma spray processes / P. Y. Gulyaev, I. P. Gulyaev, I. V. Milyukova, H. Z. Cui. – EDN UFQMIX // *High Temperatures – High Pressures*. – 2015. – Vol. 44, № 2. – P. 83–92.