Міністерство освіти і науки України
ІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
Інженерно-фізичний факультет

Мезоскопічна фізика та моделювання матеріалів

методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт

для студентів
спеціальності 132 - Матеріалознавство
денної та заочної форм навчання

Рекомендовано вченою радою Інженерно-фізичного факультету НТУУ «КПІ»

КИЇВ
НТУУ «КПІ»
2015

Філатов О. В. Мезоскопічна фізика та моделювання матеріалів [Текст]: методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт для студентів напряму підготовки 6.050403 „Інженерне матеріалознавство” спеціальності 7.05040302, 8.05040302 „Фізичне матеріалознавство” денної та заочної форм навчання / Уклад: О. В. Філатов. – К.: НТУУ „КПІ”, 2015. - 28 с.

.

Гриф надано Вченою радою
Інженерно-фізичного факультету НТУУ „КПІ”
(Протокол № 10/15 від 26.10.2015 р.)

Ухвалено на засіданні кафедри фізики металів ІФФ НТУУ «КПІ»
(протокол №9/15 від 22.04.2015 р.)

Навчальне видання

Мезоскопічна фізика та моделювання матеріалів

методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт для студентів спеціальності “Фізичне матеріалознавство”

для студентів
напряму підготовки 6.050403 – Інженерне матеріалознавство
спеціальності 7.05040302, 8.05040302 – Фізичне матеріалознавство
денної та заочної форм навчання

Укладач: *Філатов Олександр Валентинович,* ст. н. с., д. ф.-м. наук

Відповідальний редактор: *Холявко Валерія Вікторівна,* доц., канд. техн. наук

Рецензент: *Мазанко Володимир Федорович*, проф., д. техн. наук

Розглянуто ряд задач матеріалознавства, фізики металів і нанофізики, що виникають при дослідженні механічних, теплових, дифузійних властивостей металів і сплавів на нанометровому рівні, в тому числі при дослідженні атомних механізмів дифузії, деформації, плавлення моделюванням методом молекулярної динаміки. Увагу приділено конкретній реалізації алгоритмів, аналізу результатів і порівнянню з експериментальними даними.

Лабораторні роботи розраховані на студентів всіх форм навчання кафедри фізики металів НТУУ «КПІ» та інших матеріалознавчих спеціальностей вищих навчальних закладів України. Може бути використаний при підготовці аспірантів та в роботі наукових працівників, що спеціалізуються в галузі фізики металів, нанофізики і матеріалознавства.

За редакцією укладачів

Зміст

ВСТУП

Лабораторні роботи з курсу “Мезоскопічна фізика та моделювання матеріалів” розраховані на студентів п’ятого курсу спеціальності "фізичне матеріалознавство", і спрямовані на вивчення властивостей матеріалів на нанометровому рівні та процесів, що відбуваються в матеріалах на атомному рівні за допомогою моделювання методом молекулярної динаміки: вивчення загальних закономірностей дифузії, вплив розміру частинок на теплові властивості, вивчення механічних властивостей та механізмів деформації, та ін.

Навчальна дисципліна базується на курсах загальної фізики, фізики металів, фізичних методів дослідження металів, металознавства та термічної обробки металів, теорії масопереносу у матеріалах, математичної фізики, комп’ютерного моделювання. В лекційному матеріалі надаються фундаментальні знання щодо розмірних ефектів, методів отримання зразків та їх дослідження, в тому числі моделюванням методом молекулярної динаміки.

Даний навчальний посібник призначено для проведення лабораторних занять, але в кожному розділі також наводяться теоретичні відомості, необхідні для вирішення поставлених завдань.

Техніка безпеки при виконанні роботи на комп’ютері (для всіх робіт).

До самостійної експлуатації електроапаратури допускається тільки навчений персонал не молодше 18 років, придатний по стану здоров’я і кваліфікації до виконання зазначених робіт.

Перед початком роботи переконатися в справності електропроводки, вимикачів, штепсельних розеток, за допомогою яких устаткування включається в мережу, наявності заземлення комп’ютера, його працездатності.

Щоб уникнути ушкодження ізоляції проводів і виникнення коротких замикань не дозволяється: вішати що-небудь на проводи, зафарбовувати і білити шнури і проводи, закладати проводи і шнури за газові і водопровідні труби, за батареї опалювальної системи, висмикувати штепсельну вилку з розетки за шнур, зусилля повинне бути прикладене до корпуса вилки.

Для виключення поразки електричним струмом забороняється: доторкатися до екрана і до тильної сторони блоків комп’ютера, працювати на засобах обчислювальної техніки і периферійному устаткуванні мокрими руками, працювати на устаткуванні, що має порушення цілісності корпуса, порушення ізоляції проводів, несправну індикацію включення, з ознаками електричної напруги на корпусі, класти на засоби обчислювальної техніки і периферійне устаткуванні сторонні предмети.

Забороняється під напругою очищати від пилу і забруднення електрообладнання.

Рекомендується періодично (1 - 2 рази на рік) за допомогою пилососа видаляти пил із блоку живлення через вентиляційні отвори без відкриття системного блоку. Ремонт електроапаратури проводиться тільки фахівцями-техніками з дотриманням необхідних технічних вимог. Відкриття корпусу монітора користувачем неприпустимо.

Щоб уникнути поразки електричним струмом, при користуванні електроприладами не можна доторкатися одночасно трубопроводів, батарей опалення, металевих конструкцій, з’єднаних із землею і корпусів приладів.

Неприпустиме використання неякісних компонентів у системі електропостачання, а також сурогатних замінників: розеток, подовжувачів, перехідників, трійників. Неприпустимо самостійно модифікувати розетки для підключення вилок, що відповідають іншим стандартам. Електричні контакти розеток не повинні випробувати механічних навантажень, зв’язаних з підключенням масивних компонентів (адаптерів, трійників і т.п.).

Усі живильні кабелі і проводи повинні розташовуватися з задньої сторони комп’ютера і периферійних пристроїв.

Забороняється робити які-небудь операції, зв’язані з переміщенням компонентів комп’ютерної системи без попереднього відключення живлення.

Комп’ютер не слід установлювати поблизу нагрівальних приладів і систем опалення.

Система гігієнічних вимог. Вимоги до відеосистеми.

Монітор комп’ютера повинний задовольняти наступним міжнародним стандартам безпеки:

за рівнем електромагнітних випромінювань — ТСО 95;

по параметрах якості зображення (яскравість, контрастність, мерехтіння, антивідблискові властивості й ін.) — ТСО 99.

На робочому місці монітор повинний установлюватися так, щоб виключити можливість віддзеркалення від його екрана в бік користувача джерел освітлення приміщення.

Відстань від екрана монітора до очей користувача повинне складати від 50 до 70 см. Оптимальне розміщення монітора на відстані 1,5 D від очей користувача, де D — розмір екрана монітора по діагоналі. Для роботи з текстами мінімально припустима частота кадрів 72 Гц. Для роботи з графікою рекомендується частота кадрів від 85 Гц і вище або LCD дисплей.

Оформлення звіту та порядок його подання (для всіх робіт).

1. Звіти в форматі Word або Exel та стартові файли повинні бути в електронному вигляді. В паперовому вигляді звіту повинні бути представлені назва роботи, прізвище студента, група, основні результати та висновки.
2. Графіки повинні бути з масштабом, чисельними значеннями та назвою і розмірністю по кожній вісі.
3. Пояснити, звідки і як були отримані всі значення, яка їх розмірність.
4. Проаналізувати похибку отриманих значень.
5. Як можна зменшити цю похибку?
6. Врахувати рекомендації по округленню отриманих значень.

Робота №1. Моделювання кристалічної будови металів або сплавів з точковими дефектами в програмі XMD і візуалізація її в програмі VMD

1. Мета роботи

Навчитися будувати ґратки металів або сполук та точкових дефектів кристалічної будови в програмі XMD для розрахунків методом молекулярної динаміки (МД) і виконувати візуалізацію трьохвимірної кристалічної будови в програмі VMD.

2. Об'єкт дослідження

Кристали металів або сплавів з точковими дефектами.

3. Підготовка до лабораторної роботи

Программа XMD (Molecular Dymamics for Metals and Ceramics) з прикладами знаходиться на сайті: http://xmd.sourceforge.net/

Програма забезпечує:

- Постійну температуру, використовуючи алгоритм повторного масштабування швидкості (команда CLAMP).
- Постійний тиск, використовуючи алгоритм Andersen's чи простий алгоритм повторного масштабування об'єму, що підходить для періоду ґрат при температурних обчисленнях (Команда PRESSURE).
- Ефективну релаксацію системи (команда QUENCH).
- Фіксацію обраних атомів у просторі (команда FIX).
- Фіксацію обраних атомів у рядку чи площині (команда CONSTRAIN).
- Накладення зовнішньої сили до індивідуальних атомів (команда EXTFORCE).
- Забезпечення зв'язку обраних атомів у їхніх початкових положеннях із пружністю, що відповідають різним жорсткостям пружини (команда EXTSPRING).
- Застосування коефіцієнтів демпфірування швидкості до обраних атомів (команда DAMP).
- Використання парних потенціалів, потенціалів зануреного атома (EAM), потенціалу Tersoff's для карбіду кремнію, чи потенціалу Stillinger-Weber для кремнію.

Вивід даних

- Збереження стану моделювання для продовження (команда WRITE STATE).
- Запис енергії системи (ESAVE і команди WRITE ENERGY), атомних напружень (SSAVE і команди WRITE STRESS), координат атомів (команда WRITE PARTICLE) і іншої інформації в текстових файлах під час моделювання.
- Координати можуть бути збережені в спеціальному компактному форматі (команди RCV чи COR) для більш пізнього використання із супутніми програмами, такими як WMOVIEC, що робить кінофільми.
- Збереження координат атомів у файлі даних Банку Білків (команда WRITE PDB), чи стандартний формат XYZ (команда WRITE XYZ).

Команда CLAMP [SEL] {temp [cstep] OFF}підтримує температуру. Для Монте-Карло temp використовується як больцманівська температура, і cstep ігнорується. Для МД швидкості часток масштабуються на (T/temp)(l/(2*cstep)) на кожнім кроці у часі. Тут T - миттєва системна температура. Використання цього коефіцієнта має ефект призначення швидкостей часток, що відповідає температурі

temp. Параметр cstep використовується, щоб керувати швидкістю наближення до заданої температури. Якщо temp = -1, то температура не фіксується (адіабатна система).

Банк даних білків (Protein Data Bank, PDB) — сховище для тривимірних структурних даних білків і нуклеїнових кислот. Ці дані рентгеноструктурного аналізу і ЯМР-спектроскопії можуть використовуватися безкоштовно.

Наведемо приклад запису координат в файл в форматі XYZ, він же Xmol. По рядках розташовані дані:

Число атомів N_A {Integer}
Title {String }
N_A рядків: Symbol X Y Z
Приклад файлу для $UO_2(H_2O)_5$ 2+

```
18
 uo2aq5.1.out
 O  0.01346071 -0.04536106 -1.77771885
 U  -0.01652392 -0.00972355 -0.00194565
 O  2.19708123 1.03098232 0.38560083
 O  -0.02410284 -0.07583656 1.77321855
 O  -0.23513074 2.42221798 -0.48439365
 O  1.62934915 -1.84116944 -0.10059573
 O  -1.33581310 -2.08484742 -0.18419394
 O  -2.38251223 0.62804742 0.38000531
 H  2.04981543 -2.30813557 0.65373376
 H  1.98601302 -2.24666610 -0.92052298
 H  2.59125971 1.15763843 1.27571682
 H  2.84741994 1.37539365 -0.26406969
 H  -0.25308836 2.78548735 -1.39613267
 H  -0.31307190 3.18644153 0.12668314
 H  -3.08333729 0.85698888 -0.26807421
 H  -2.79152126 0.68203288 1.27077372
 H  -1.71234895 -2.62669637 0.54273334
 H  -1.57872158 -2.52960136 -1.02508914
```

4. Методика вирішення експериментального завдання

Використовуючи періодичність ґратки кристалічних тіл побудувати розрахункову комірку металу з точковими дефектами для моделювання методом МД.

5. Устаткування, прилади та матеріали

Програми XMD, VMD.

6. Контрольні питання та завдання

1. Міжатомна відстань і стала ґратки.
2. Які граничні умови доцільно використовувати.
3. Де розташовані вакансія і міжвузловий атом. Їх концентрація в металі.
4. Далекий і близький порядок.
5. Причина і частота коливань атомів в ґратці.

7. Програма проведення експерименту

1. В програмі XMD створити кристал сплаву з ~500-1000 атомів з періодичними граничними умовами (або нанотрубку). Додати вакансію або міжвузловий атом. Матеріал: Al-Si-C (csipair.xm.txt); Carbon Nanotube (nanotube.xm.txt), Ni-Al, Ni-Al-H, Nb-Al, Al-Ru, Al-Ti, Ag-Cu, Fe-Ni, Cu-Fe-Ni, Al, Au, Cu, Fe, Mo, Ni, Nb, Co.
2. Релаксувати кристал при різних температурах. Записати в файл координати атомів на кількох кроках у часі. Потенціали і копія програми знаходяться в розділі: stud_data/XMD/Potential.

Приклад коду code.xm:

```
read  Ni_Al_H.txt # використовуємо потенціал для Ni_Al_H

box 6 8 8 # Make repeating box and lattice
particle 2 # bcc
2 0.25 0.25 0.25
1 0.75 0.75 0.75
dup 5 1 0 0
dup 7 0 1 0
dup 7 0 0 1
#fill boundary box 2.2 2.7 2.7 2.3 2.8 2.8  # Make box in interstitial position
fill particle 1    # add H in interstitial
3 2.25 2.75 2.75
#fill align 1 1 1
#fill orient 1 0 0 0 1 0 0 0 1
fill go

dtime 1e-15
select type 1
mass 58.710   # Ni
select type 2
mass 26.982  # Al
select type 3
mass 1.0080  # H

# add 2 vacancies
select index 159
remove select
select index 138
remove select
#scale lattice NiAl in units of A
scale 2.88
#pressure for T=300K and start temperature 300K
clamp 300
itemp 300
write pdb NiAl_vac_H.pdb    {write coordinates in file}

repeat 20
        # calculate 50 time steps
        cmd 50
        write pdb +NiAl_vac_H.pdb
        calc itemp =itemp +10
end
```

Запуск коду на виконання через файл start.bat, в якому прописати:
xmd.exe code.xm
В назвах використовувати тільки латиницю.

Інший приклад коду:

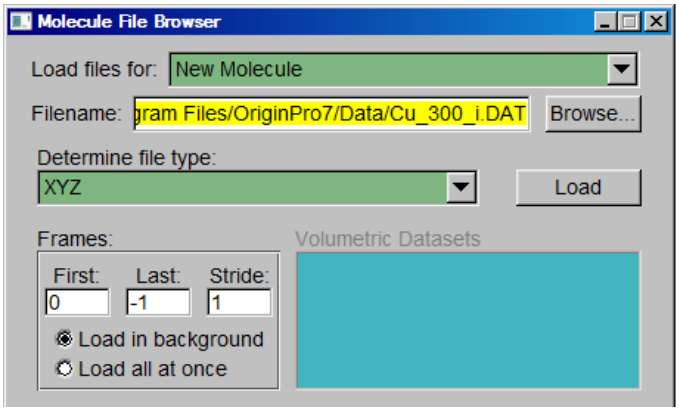
```
-------- an example were we create a lattice---------
read    Mo.txt # використовуємо потенціал для Mo
read    variables.xm  # читаемо змінні з визначеного файлу
# Make repeating box and lattice (in units of A)
box 5 5 5
fill particle 2     #For BCC
   1   0.0     0.0     0.0
   1   0.5     0.5     0.5

fill particle 4   #For FCC
1          0.0       0.0       0.0
1          0.5       0.5       0.0
1          0.5       0.0       0.5
1          0.0       0.5       0.5

fill align   xc yc zc
fill orient     1 0 0   0 1 0   0 0 1
fill go
calc dtime=1e-15
dtime dtime
select all
mass 95.94        {Для міді маса= 63.54}
clamp T
scale 3.147                  {Для міді період ґратки = 3.615 A}
calc dk=dt*VB*1e8
WRITE PDB bdbxc.pdb  {запись координат в файл}
repeat 20
       cmd 200
       WRITE PDB +bdbxc.pdb  {додаємо координати в файл}
End
```

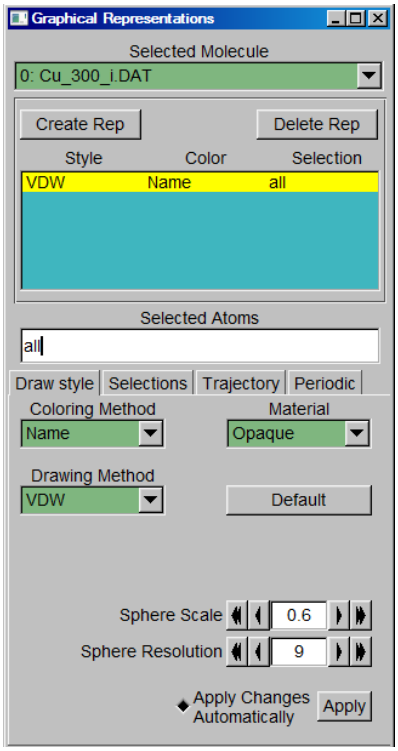
8. Опрацювання результатів експерименту

1. Візуалізувати трьохвимірну ґратку в програмі VMD.
Використати файл з координатами атомів.



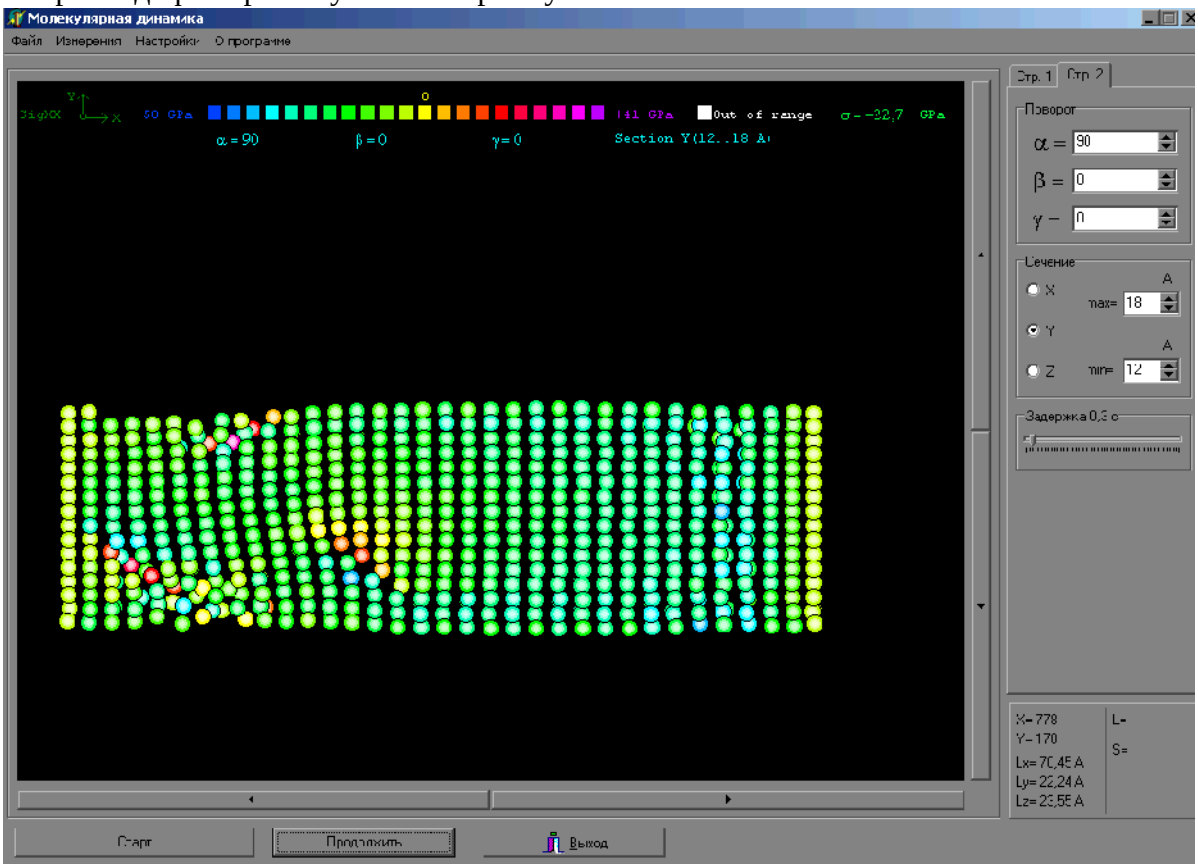
File -> New Molecule -> Brose -> …

Determine file type: XYZ або PDB
Load



Graphics -> Representation -> Drawing Method -> VDW,
Sphere Scale -> 0.3,
Sphere Resolution -> 9.
Display -> Orthographic

Керування мишкою використовується для наближення і повороту.
2. Пояснити алгоритм забудови ґратки, дефекта, запису координат атомів в XMD.
3. Пояснити поведінку атомів на межах розрахункової комірки.
4. Ознайомитися з можливістю візуалізації напружень в програмі Vision в папці Мезофізика. Наприклад: файл розтягу Mo в напрямку <110>.



Література.

1. Р. Хокни, Дж. Иствуд. Численное моделирование методом частиц. Пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
2. Д. В. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990. 176 с.
3. D. C. Rapaport. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge University Press, 1995, 564 p. www.cambridge.org/9780521825689
4. http://www.crystallography.net/ - COD (Crystallography Open Database) - база даних кристалічних структур органічних, неорганічних, метало-органічних сполук і мінералів.
5. http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php - American Mineralogist Crystal Structure Database - онлайн структурна база даних Американського мінералогічного товариства.
6. http://www.calidris-em.com/spacegroupexplorer.php - Space Group Explorer - довідник по просторовим групам симетрії кристалів.
7. http://www.iucr.org/resources/other-directories/software - сайт Міжнародного Союзу Кристалографів (International Union of Crystallography).

Робота №2. Температурна залежність амплітуди коливань атомів у вузлах кристалічної ґратки

1. Мета роботи

Визначити амплітуду коливань атомів металів методом молекулярної динаміки при різних температурах.

2. Об'єкт дослідження

Чисті метали за умов різних температур. Температуру плавлення див. в роботі №6.

3. Підготовка до лабораторної роботи

Атоми твердих тіл більшість часу проводять поблизу певних рівноважних положень, здійснюючи тільки незначні теплові коливання. Збільшення амплітуди з ростом температури сприяє процесам дифузії, утворення вакансій, теплового розширення металів внаслідок ангармонічних ефектів.

4. Методика вирішення експериментального завдання

Моделювання методом МД і спостереження за координатами атомів під час моделювання кристала дає можливість визначати величину відхилення від їх рівноважного положення.

5. Устаткування, прилади та матеріали

Програми XMD, VMD, Exel, Origin.

6. Контрольні питання та завдання

1. Характер коливань атомів в металі.
2. Які граничні умови доцільно використовувати.
3. Що таке середньоквадратичне відхилення величини.
4. Міжатомна відстань, період ґратки.
5. Величина дифузійного скачка атома в ґратці.
6. Гармонічні і ангармонічні коливання.
7. Потенціал взаємодії двох атомів.

7. Програма проведення експерименту

1. В програмі XMD створити кристал з ~1000-2000 атомів з періодичними граничними умовами. Матеріал: Al, Au, Cu, Fe, Mo, Ni, Nb, Co.
2. Релаксувати кристал при різних температурах. Записати в файл координати в часі одного атому поблизу центру розрахункової комірки.

Приклад коду:

```
read    Mo.txt
read    variables.xm
# Make repeating box and lattice (in units of a0)
box 5 5 5
fill particle 2
   1   0.0     0.0     0.0
   1   0.5     0.5     0.5
```

```
fill align   xc yc zc
fill orient     1 0 0   0 1 0   0 0 1
fill go
dtime dtime
select all
mass MASSMo
clamp T
scale A0
select INDEX 43 #обираемо атом №43
set ADD 1
select keep on
repeat 200
        cmd 20
        SELECT SET 1
        WRITE FILE +pos_vel.txt sel posvel     #Write data of selected atom
#       WRITE PDB +pos_all.pdb
end
```

8. Опрацювання результатів експерименту

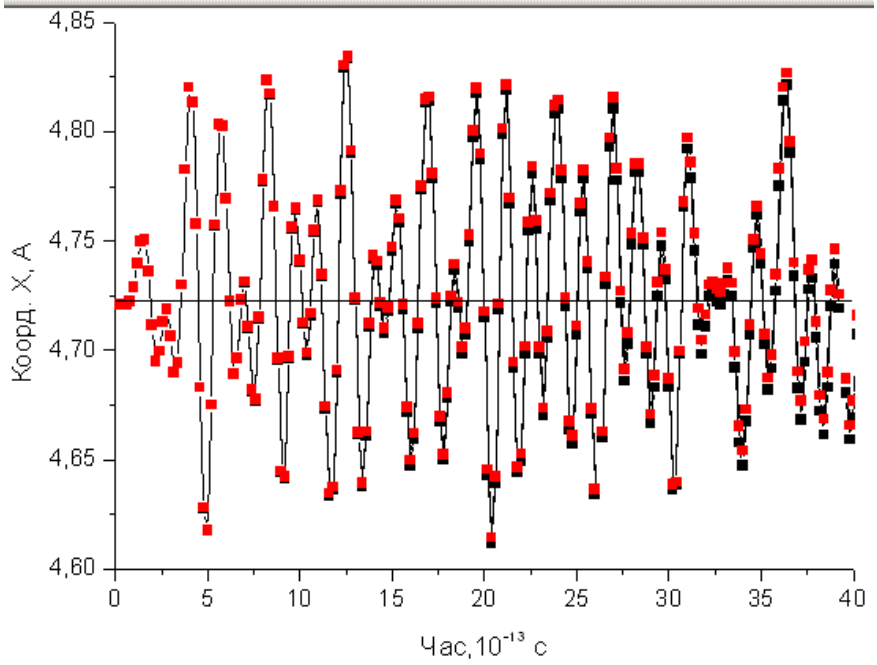
1. Імпорт в Excel координат атома.
2. Видалити зайві дані, в Word можна замінити два символи абзацу на один: ^p^p на ^p.
3. Проаналізувати координати атому за допомогою програми Origin або Excel: побудувати графік $X=f(t)$ або $Y=f(t)$, $V_x=f(t)$.
4. Спостерігати квазіперіодичні коливання (див. рис.).
5. В статистиці по стовпчикам знайти середньоквадратичне відхилення (*sd*) атомів

The standard deviation (SD): {В Excel =STDEV(A1:Z999) або СТАНДОТКЛОН}

$$SD = \sqrt{Var}$$

$$Var = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(X_i - \overline{X}\right)^2$$

	Rows(Y)	Mean(Y)	sd(yEr±)	se(yEr±)	Min(Y)	Im
A	[1:202]	4,72272	0,04992	0,00353	4,61153	



6. Провести виміри для інших температур (T=30 *K*, 300 *K*, 0,7$T_{пл}$), $T_{пл}$ див. в роботі №6.
7. Побудувати залежність амплітуди коливань з екстраполяцією від температури 0 *K* до $T_{пл}$.

8. Порівняти амплітуду коливань з міжатомною відстанню у відсотках при $T_{пл}$.
9. Пояснити можливість дифузіїї та утворення вакансій за таких умов.
10. Оцінити період коливань атомів для різних температур.

Додаток.

Середньоквадратичне відхилення σ чи стандартне відхилення s - показник розсіювання значень випадкової величини щодо її математичного очікування. Вимірюється в одиницях виміру самої величини. Дорівнює кореню квадратному з дисперсії ($Var=\sigma^2$) випадкової величини.

$$s = \sqrt{\frac{n}{n-1}\sigma^2} = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \qquad \sigma = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$$

, де $\bar{X}$ — середнє арифметичне вибірки; n — обсяг вибірки.

Відмінність стандарту (у якого в знаменнику n - 1) від кореня з дисперсії, тобто середньоквадратичного відхилення (у знаменнику n): при малому обсязі вибірки оцінка дисперсії через останню величину є трохи зміщеної, при великому обсязі вибірки різниця зникає. Якщо істинна величина невідома, то варто користатися не σ, а s.

Література.

1. Белоус М.В., Барабаш Р.И., Егоров Б. Физика металлов. К. Вища школа, 1986, 343 с.
2. Уманский Я.С., Скаков Ю.А. Физика металлов. М, Атомиздат, 1978, 352 с.

Робота №3. Вплив розміру наночастинки на теплові властивості матеріалу

1. Мета роботи

Визначення температури плавлення і теплових властивостей наночастинок різного розміру методом молекулярної динаміки.

2. Об'єкт дослідження

Зразки чистих металів нанометрових розмірів.

3. Підготовка до лабораторної роботи

Як відомо, на мезоскопічному рівні змінюються властивості матеріалів. Так, із зменшенням розмірів може змінюватися теплоємність, температура фазових переходів, в тому числі за рахунок збільшення ролі поверхні. Плавлення — перехід тіла з кристалічного твердого стану в рідкий, відбувається з поглинанням питомої теплоти плавлення і є фазовим переходом першого роду. Теплоємність C тіла при постійному об'ємі визначається як похідна від внутрішньої енергії U по температурі, тобто: $C = \mathrm{d}U / \mathrm{d}T$. Молярна теплоємність C_μ хімічно простих твердих тіл: $C_\mu = 3R$. Формула Томсона для температури плавлення частинки $T_m(r)$ від її розміру (радіусу r): $(T_m(r) - T_m)/T_m = -(v_1/L)\frac{2\sigma}{r}$, де T_m і L — температура і теплота плавлення масивного тіла, v_1 — об'єм 1г речовини, величина, обернена густині, σ — поверхневий натяг рідкої частинки.

4. Методика вирішення експериментального завдання

Моделювання методом МД і спостереження за атомною будовою під час нагріву зразків кристала дає можливість визначати початок плавлення і визначити його теплові властивості.

5. Устаткування, прилади та матеріали

Програми XMD, VMD, Exel, Origin.

6. Контрольні питання та завдання

1. Як побудувати циліндричний зразок металу в XMD.
2. Які граничні умови доцільно використовувати.
3. Що таке температура плавлення, теплоємність, теплота плавлення.
4. Фазовий перехід першого та другого роду.
5. Як визначити температуру плавлення.

7. Програма проведення експерименту

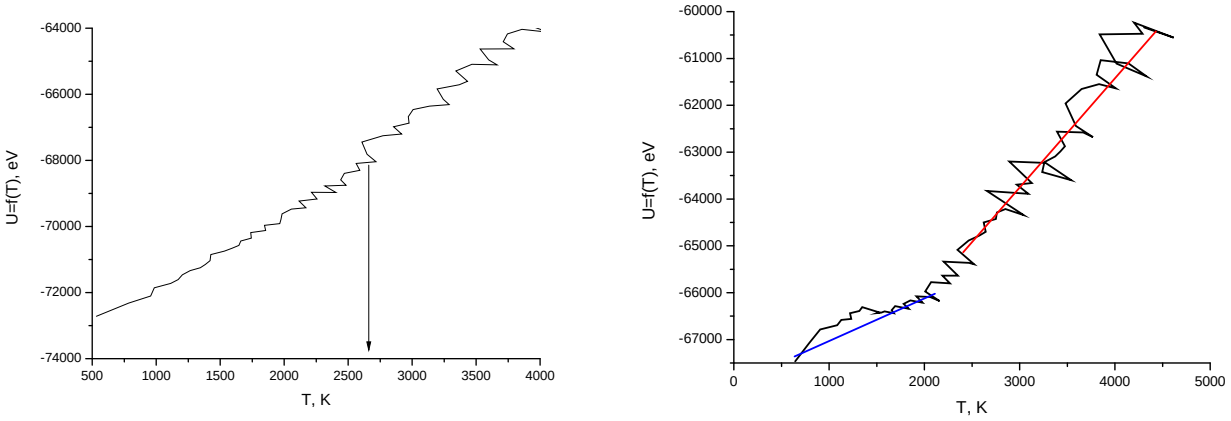
1. Створити циліндричний кристал з r=5 елементарних комірок і довжиною 7 елементарних комірок вздовж напрямку <100> з вільними граничними умовами. Матеріал: Al, Au, Cu, Fe, Mo, Ni, Nb, Co.
2. Підвищувати температуру через кожні 200 кроків на 10 – 50 K з ~0,4 до ~1,8 $T_{пл}$.

```
#                                  r l  Xc Yc Zc orientation
FILL BOUNDARY CYLINDER 5 7 20  20 20   1 0 0
fill particle 2 #(BCC)
   1   0.0     0.0     0.0
   1   0.5     0.5     0.5
fill align   20 20 20
fill cell
  1 0 0
  0 1 0
  0 0 1
```

```
fill go
eunit eV                    # erг/ат для Al, Ru, eV/ат для Au, Fe, Ni, Mo
esave 200 Energy.dat        #E_pot, E_total
box 40 40 40 #(якщо кристал розірваний – змінити розмір боксу або змістити координати центру циліндра)
scale A0
calc dtime= 1e-15
dtime dtime
clamp off
# Set initial temp variable
calc TEMP=1000
# Do 70 separate runs of 200 steps each
repeat 70
  itemp TEMP
  cmd  200
  WRITE PDB +MoXYZ.pdb
  WRITE FILE +Tempr.dat  TEMP
  calc TEMP = TEMP + 20
end
```

8. Опрацювання результатів експерименту

1. В програмі VMD проаналізувати структурні зміни.
2. З файла Energy.dat, в якому по колонках записані Nstep; E_total; E_pot=*U*; E_kin~*T*; (eB, ерг або Дж), використати значення потенціальної енергії, що визначається положенням атомів, а температуру з файла Tempr.dat (*K*). Побудувати графік *U=f(T)*:



3. Знайти *T* плавлення за перегином при апроксимації прямими (зміна теплоємності), за ростом *U* при постійній *T* (рис.) та за допомогою візуального контролю структури в VMD по зникненню далекого порядку.
4. Зменшити товщину наночастинки в ~ 2 рази до 4 елементарних комірок. Визначити $T_{пл}$.
5. Побудувати залежність $T_{пл}$ від оберненого розміру частинки (1/*r*), порівняти з $T_{пл}$ для масивного матеріалу (див. роботу №6). Перевірити формулу Томсона.
6. Визначити питомі теплоємність твердого тіла і рідини, питому теплоту фазового перетворення, порівняти їх з літературними даними, див. Додаток.
7. Пояснити розбіжності.

Література.

3. Л. Н. Лариков, Ю. Ф. Юрченко. Тепловые свойства металлов и сплавов. К.: Наукова думка, 1985, 438 с.
4. А. В. Филатов. Моделирование микрокристалла меди методом частиц при нагреве и охлаждении // Вісник Черкаського університету, 1999, Серія “Фіз.-мат. науки”, с. 97-101.

Робота №4. Вивчення структури металів за допомогою функції радіального розподілу атомів

1. Мета роботи

Дослідження параметрів структури металів в кристалічному та рідкому стані за допомогою визначення ФРР атомів моделюванням методом молекулярної динаміки.

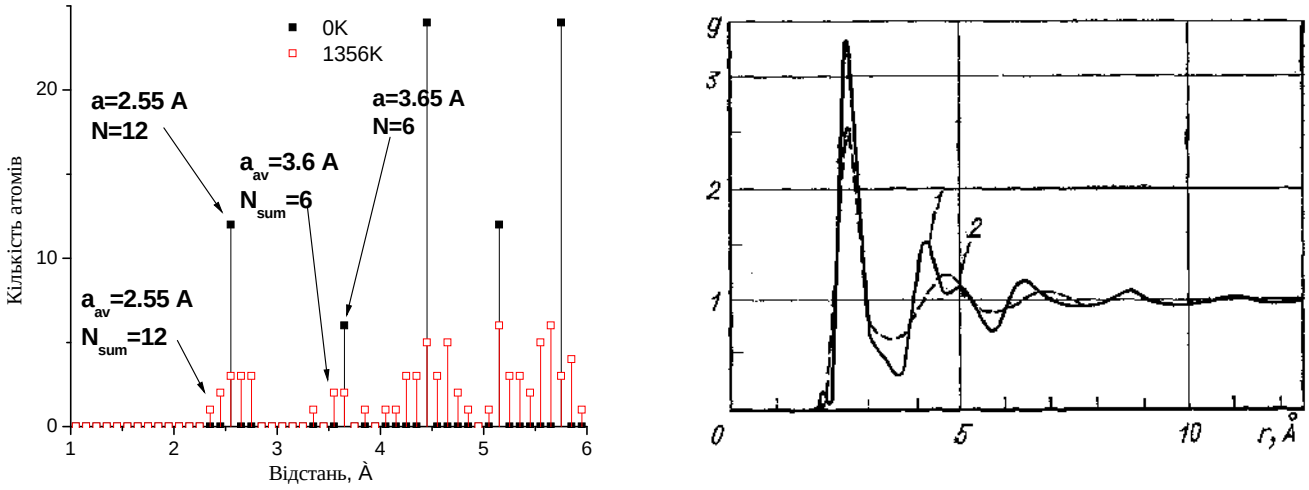
2. Об'єкт дослідження

Чисті метали за умов різних температур.

3. Підготовка до лабораторної роботи

Для аналізу структури кристалічних тіл використовується опис розміщення атомів у кристалічних ґратах у представленні координаційних сфер. Тверді аморфні і рідкі речовини за своєю будовою представляють неупорядковані системи, у яких відсутній далекий порядок і тривимірна періодичність. Однак у них існує близький порядок. Параметрами, що характеризують близький порядок, є величини найближчих відстаней — перших, других, третіх, що визначають координаційні сфери, — і число атомів навколо атома, обраного за початковий, у першій, другій, третій координаційних сферах, тобто координаційні числа. У будь-якій точці аморфної чи рідкої речовини цей порядок зберігається до приблизно третьої - четвертої координаційної сфери від відлікового атома.

Функцію радіального розподілу атомів (ФРРА) *g(r)* вводять для опису взаємного розподілу атомів. Ця функція визначає щільність імовірності перебування будь-якого атома на відстані *r* від вихідного атома (рис. 4.1).



а б

Рис. 4.1. Розподіл атомів для міді (ГЦК) в кристалічному і рідкому стані в представленні координаційних сфер (а), ФРРА *g(r)* для заліза в аморфному стані (1) і в рідкому стані при 1560 С (2), (б).

Уявимо, що в шарі $4\pi r^2 dr$ (де dr – товщина шару), знаходиться dn атомів. Тоді кількість атомів в одиниці об'єму цього шару на відстані r від початку координат (функція атомної густини):

$$\rho = \frac{dn}{4\pi r^2 dr} \quad (4.1).$$

Тоді ФРРА:

$$g(r) = \frac{V}{N}\rho(r) = \frac{1}{\rho_{ат}}\rho(r) \qquad (4.2),$$

де $\rho_{ат}$ - середнє число атомів в одиниці об'єму, V – об'єм, N – число атомів. Якщо шар відповідає першій координаційній сфері, то dn є першим координаційним числом. В інтервалі r від 0 до двох атомних радіусів $g(r)$=0. При $r \to \infty$ $g(r)$=1. Для характеристики структури аморфних тіл також використовують $\rho_{ел}$ - функцію радіального розподілу електронної густини, яка пов'язана з ФРР: $\rho_{ел} = g(r)\,\rho_0$, де ρ_0 - середня електронна густина речовини. Радіальний розподіл електронної густини однокомпонентних матеріалів може бути знайдений Фурьє-перетворенням розподілу інтенсивності розсіяння рентгенівських променів:

$$4\pi r^2\left(\rho_{ел}(r) - \rho_0\right) = \frac{2r}{\pi}\int_0^{\infty} k\left(\frac{J(k)}{Nf^2} - 1\right)\sin(kr)dk \quad (4.3),$$

де k − модуль хвильового вектора ($k=\sin\theta/\lambda$), f − атомна амплітуда розсіяння, $J(k)/N$ − інтенсивність розсіяння в електронних одиницях на одиницю складу.

Функція радіального розподілу приймає максимальні значення поблизу значень r, що відповідають найбільш ймовірним міжатомним відстаням і проходить через мінімум між цими положеннями. Положення максимумів на кривій ототожнюється з радіусом відповідної координаційної сфери атомів. Якщо максимуми функції розмиті, це свідчить про розкид міжатомних відстаней r біля найбільш ймовірної відстані, що відповідає положенню максимуму цієї функції. Площа під піком дає відповідне координаційне число.

Розмір області локального порядку можна визначити як відстань, за межами якого функція радіального розподілу стає близької до 1 (рис. 4.1.б). Функція $g(r)$ сферично-симетрична, з її допомогою можна знайти величини відстаней r. ФРР перестає осцилювати на відстані, що називається відстань кореляції. На цій відстані порядок в розташуванні атомів повністю зникає.

ФРРА є зручним інструментом для спостереження за зміною структури, наприклад поява більш щільного пакування з великим координаційним числом при збільшенні тиску (принцип Ле-Шательє). Виявлення близького порядку і є метою дослідження структури аморфних і рідких речовин. Тверді аморфні речовини різко відрізняються від рідких тем, що в них атоми в основному залишаються на тих самих місцях, у той час як у рідкому стані вони рухаються, міняючись місцями з іншими атомами. Особливий інтерес представляє зіставлення даних для тієї самої речовини в трьох станах — твердому кристалічному, твердому аморфному і рідкому. Цей інтерес викликаний необхідністю створення моделей структури і теорії аморфного і рідкого станів речовини.

Кількість атомів і положення координаційних сфер кристалів проявляється в розташуванні і інтенсивності рентгенівських ліній відповідного матеріалу, як зображення оберненої ґратки, рис. 4.2 :

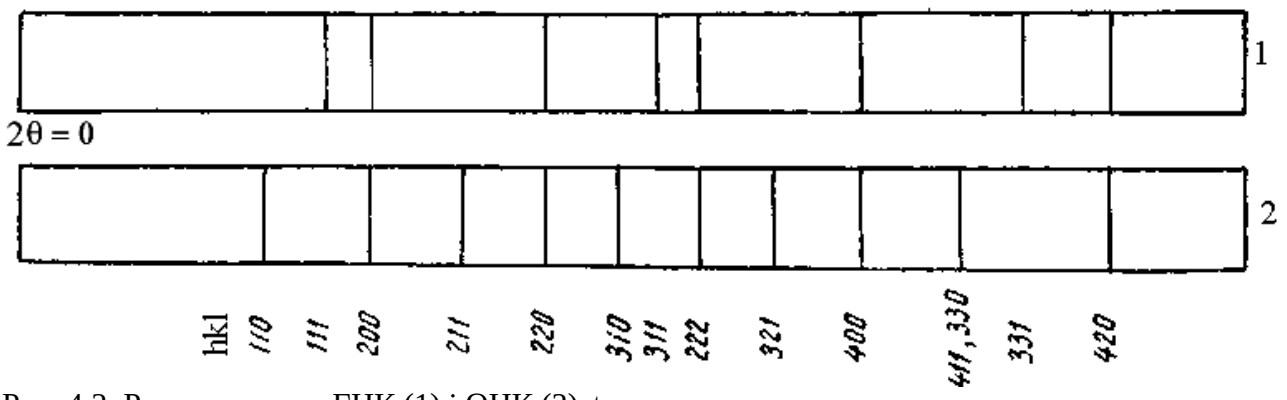


Рис. 4.2. Рентгенограма ГЦК (1) і ОЦК (2) ґратки.

4. Методика вирішення експериментального завдання

Моделювання метала за відповідної температури дає можливість визначати координати всіх атомів, що дозволяє розрахувати ФРР для кристалічного і рідкого стану.

5. Устаткування, прилади та матеріали

Програми XMD, VMD, Exel, Origin.

6. Контрольні питання та завдання

1. Як побудувати ґратку металу в XMD. Типи ґраток.
2. Що таке періодичні умови, чи доцільно їх використовувати.
3. Що таке ФРРА.
4. Поняття про координаційні сфери, щільність пакування ґратки.
5. Чим відрізняється тверда аморфна речовина від рідини.
6. Що таке далекий і близький порядок.

7. Програма проведення експерименту

1. Створити кристал з ~1000-2000 атомів з періодичними граничними умовами. Матеріал: Al, Au, Cu, Fe, Mo, Nb, Ni, Co.
2. Релаксувати матеріал при температурах 0,1 і 1,5$T_{пл}$.
3. Записати в файл координати атомів.

8. Опрацювання результатів експерименту

1. Розрахувати нові координати атомів, використовуючи положення обраного атома поблизу центру розрахункової комірки за початок координат.
2. Побудувати гістограму розподілу атомів за відстанню до 7 А з інтервалом 0,1 А для температур T=0,1 і 1,5$T_{пл}$, виходячи з координат атомів. Відстань від обраного атома (наприклад 125-го) розрахувати за теоремою Піфагора, наприклад в Exel: D1=((A125-A1)^2+(B125-B1)^2+(C125-C1)^2)^0.5 . Аналогічну функцію побудови гістограми в XMD виконує команда RDF. Вона може записати в файл кількість атомів, які знаходяться в розрахунковій комірці на певній відстані, наприклад, від 1,5 до 8 А з розбиттям на 65 інтервалів: WRITE file +rdf.txt RDF 65 1.5 8.
3. Побудувати ФРРА за формулами 4.1 і 4.2. Величини *dn* взяти з попереднього пункту, як і *dr*=0,1 А.
4. Побудувати ФРРА в VMD: Extensions ->Analysis -> Radial Pair Distribution Function g(r).
5. Знайти координаційні числа для кристалу і рідини в трьох перших координаційних сферах.
6. Знайти відстані до атомів в цих сферах (за положенням центрів ваги піків).
7. Порівняти щільність пакування атомів в різних типах ґраток і рідині, та їх густину.
8. Пояснити, як узгоджуються ФРР і розташування дифракційних ліній на рентгенограмах.

Література.

1. Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Металлургия, 1982. - 632 с.
2. Китайгородский А.И. Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. М.: Гостехиздат, 1950. - 589 с.
3. А. Ф. Скрышевский. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел. М.: Высшая школа, 1980. – 328 с.

Робота №5. Структурні зміни в нанокристалі при деформації розтягу

(Робота розрахована на два заняття)

1. Мета роботи

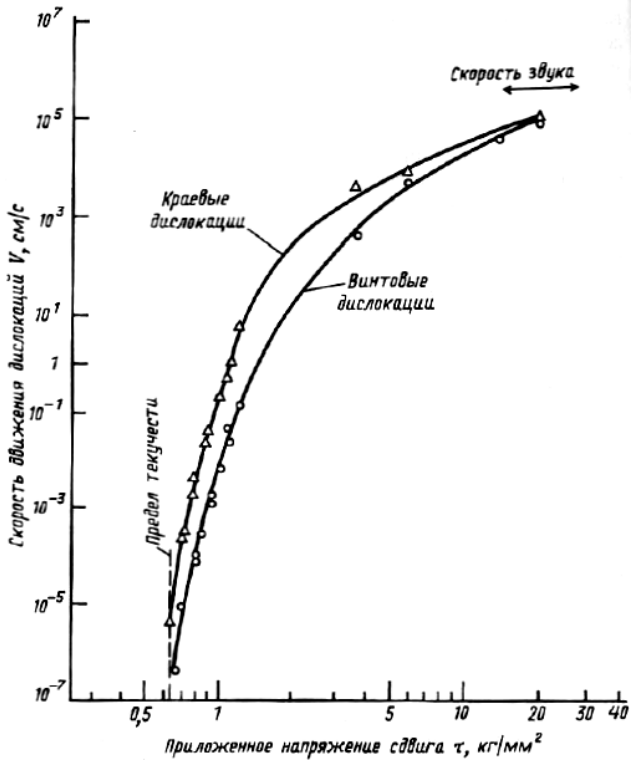
Дослідити механізм деформації нанокристалу металу моделюванням методом МД.

2. Об’єкт дослідження

Циліндричний зразок нанокристалу металу.

3. Підготовка до лабораторної роботи

Під дією зовнішніх сил у монокристалі виникають напруження. Поки вони не перевищили межу пружності, відбувається пружна деформація. При пружній деформації атоми відхиляються з положення стійкої рівноваги на відстані, що не перевищують міжатомні. У випадку зняття навантаження атоми повертаються в положення стійкої рівноваги, змін форми, будови і властивостей металу не відбувається. Пружна деформація супроводжується незначною оборотною зміною об’єму тіла. Наприклад, для міді при всебічному стиску 10 ГПа зменшення об’єму складає менше 4%.



Зі збільшенням зовнішнього навантаження збільшуються і відхилення атомів. При досягненні межи пружності ґратка втрачає стабільність, атоми зміщуються в нові місця стійкої рівноваги на відстані, що можуть перевищувати міжатомні. Після зняття навантаження форма кристала не відновлюється, відбувається пластична деформація. Незворотні зсуви атомів у монокристалі відбуваються в основному у виді ковзання дислокацій й у виді двійникування (частіше в ГЦК кристалах). Швидкість ковзання залежить від напруження, дивись рис. [4].

Зсув відбувається по особливих кристалографічних площинах в напрямках щільного пакування проходженням дислокації. Для заліза теоретичне значення зсувного напруження $\tau_{теор}$ = 13300 МПа, експериментальні значення для полікристалів $\tau_{реал}$ = 20 МПа. За певних умов сліди ковзання можна спостерігати у виді смуг на поверхні металу. Двійникування, що в основному відбувається при великих швидкостях ударних навантажень, полягає в зсуві групи атомів відносно особливої площини - площини двійникування.

Відносне видовження під час деформації $e=(l_2-l_1)/l_1$, де l_2 — довжина зразка після деформації; l_1 — вихідна довжина. Увага: не враховувати захвати! 1ГПа = 100 кг/мм^2.

4. Методика вирішення експериментального завдання

Спостереження за атомними перебудовами в нанокристалі під час деформації дає можливість визначити параметри і механізм деформації металу.

5. Устаткування, прилади та матеріали

Програми XMD, VMD, Exel, Origin.

6. Контрольні питання та завдання

1. Як побудувати циліндричний зразок металу в XMD.
2. Які граничні умови доцільно використовувати.
3. Що таке пружна і пластична деформація, її величина.
4. Як визначити кристалографічний напрямок та площину.
5. Площина та напрямок ковзання дислокацій в різних типах ґраток.
6. Фізичні обмеження на швидкість руху дислокацій.
7. Межа пружності.

7. Програма проведення експерименту

1. Створити циліндричний кристал вздовж заданого напрямку (*l:D* =3) з ~2000 атомів з вільними граничними умовами. Матеріал: Al, Au, Cu, Fe, Mo, Ni, Co.
2. Плавно підняти температуру до 100 K.
3. Промоделювати одновісний розтяг до 60000 кроку при 100*K* в напрямку <110> (ОЦК) або <100> (ГЦК) за торці циліндру. У випадку відриву захватів зменшити швидкість розтягу.

Числа в команді: T=100K, *l:D* =3, кінцева деформація 100.0%, вісь 0X [110], вісь 0Y [001]:

```
Start.bat: xmd-2.5.32.exe start.xm 100 3 100.0 1 1 0 0 0 1
Start.xm:
read       mo.txt
read       variables.xm       #читаємо значення змінних з командного рядка
FILL BOUNDARY CYLINDER D/2 L+2*WS xc yc zc 1 0 0  # WS = length/diameter
fill particle 2
   1       0.0       0.0       0.0
   1       0.5       0.5       0.5
fill align   xc yc zc
fill cell
  1 0 0
  0 1 0
  0 0 1
fill orient     $4 $5 $6     $7 $8 $9     ($5*$9-$6*$8) ($6*$7-$4*$9) ($4*$8-$5*$7)
              #  X axis        Y axis                          Z axis
fill go
select all
mass MASSMo
itemp T
clamp T
eunit K
select box          0 0 0      xc-L/2 By Bz
set add 1
select box          xc+L/2 0 0          Bx By Bz
set add 2
box Bx By Bz
scale A0
#WRITE PDB XYZ.pdb
clamp T
ssave 100 stress.s  #запис напружень в зразку кожні 100 кроків, зазвичай в Ерг, Па=Ерг/(атомн. об'єм)
WRITE PDB +XYZ.pdb
calc dk=dt*Velosity*1e10
select set 1
FIX on
select set 2
```

```
FIX on
select all
repeat allsteps/200                    !
        repeat 1
                cmd 200
                select set 1
                FIX off
                move -dk 0 0
                FIX on
                select set 2
                FIX off
                move +dk 0 0
                FIX on
        end
    WRITE PDB +XYZ.pdb
end
```

Файл Variables.xm з позначенням змінних:

```
# $1 - T
# $2 – length/diameter
# $3 - deformation
# $4-$6   x1,x2,x3
# $7-$9  y1,y2,y3
calc D=5.0
calc L=D*$2
calc xc=L*($3+2)
calc yc=D*4
calc zc=D*4
calc Bx=XC*2
calc By=YC*2
calc Bz=ZC*2
calc WS=3
calc Velosity=50*20
calc T=$1
calc dt=1e-15
dtime dt
calc allTime=$3*L*1e-8/Velosity
calc AllSteps=allTime/dt
write AllSteps
```

8. Опрацювання результатів експерименту

1. В програмі VMD проаналізувати структурні зміни.
2. Визначити граничну пружну деформацію.
3. Порівняти з даними для макроскопічних зразків (~ 0,05% - 0,2%), пояснити результат.
4. Побудувати графік зміни напружень в зразку з розтягом $\sigma=f(e)$.
5. Розрахувати межу пружності з закону Гука, порівняти з літературними даними міцності.
6. Визначити тип дефекту, його кристалографію. Порівняти з літературними даними.
7. Визначити швидкість руху дефекту (врахувати крок у часі між кадрами). Порівняти зі швидкістю звуку і літературними даними, нанести отримане значення на рисунок.

Література

1. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. М.: Металлургия, 1975. 208с.
2. A. Filatov, S. Kotrechko, O. Ovsjannikov. Peculiarities of plastic deformation and failure of nanoparticles of b.c.c. transition metals // Materials Science Forum Vols. 567-568 (2007) pp. 65-68.
3. Р. Хоникомб. Пластическая деформация металлов. М.: Мир, 1972. 406 с.
4. Бутягин П. Ю. Химическая физика твердого тела. М.: Изд-во МГУ, 2006. 272 с.

Робота №6. Знаходження коефіцієнту самодифузії в металах

(Робота розрахована на два заняття)

1. Мета роботи

Розрахунок параметрів самодифузії за міжвузельним механізмом в металах моделюванням методом молекулярної динаміки.

2. Об'єкт дослідження

Чисті метали, що містять власні міжвузлові атоми (МА).

3. Підготовка до лабораторної роботи

Енергія активації E в рівнянні Ареніуса визначає температуру, вище якої дифузія стає значною. Будь-які процеси, залежні від рухливості частинок, починають проходити зі значною інтенсивністю лише коли температура перевищує значення E/k_B. Частинки перебувають в потенціальних ямах, відокремлених від сусідніх ям потенціальним бар'єром із висотою E. Для подолання бар'єру частинка повинна отримати за рахунок теплового руху енергію, вищу за висоту потенціального бар'єру. Ймовірність того, що класична частинка (атом) матиме певну енергію, визначається розподілом Больцмана. Відомо, що робота дорівнює зміні вільної енергії системи зі зворотнім знаком. Ймовірність утворення флуктуації, що визначає дифузію: $W \sim \exp(-\Delta F / RT) = \exp(\Delta S / R)\exp(-\Delta U / RT)$,

де ΔU - зміна внутрішньої енергії, ΔS - зміна ентропії системи, пов'язана з утворенням флуктуації. Це й визначає температурну залежність коефіцієнту дифузії $D_T=D_0*exp(-E/k_BT)$. При дуже високій температурі $k_BT>>E$ коефіцієнт дифузії дорівнює D_0. У вираз для $D_0=1/6\cdot\Delta^2\cdot\nu\cdot exp(\Delta S^m_i/k)$ входить довжина стрибка Δ і частота коливань атомів ν, ΔS - ентропія активації під час стрибка, в першому наближенні ≈ 0. Тут не враховується ентальпія утворення ΔH^f_i і ентропія утворення ΔS^f_i міжвузлового атому, тому що їх концентрація в моделі не змінюється.

Параметри самодифузії в металах за різними механізмами [1, 3].

Матеріал, тип ґратки	$T_{пл}$, (К)	Діапазон, (К)	D, (м^2/с)
Al (ГЦК)	933	723-923	$1{,}71\cdot10^{-4}\exp(-142/RT)$
Au (ГЦК)	1337	1031-1333	$8{,}4\cdot10^{-6}\exp(-174/RT)$
Cu (ГЦК), вакансії міжвуз. атоми (c=1/2000)	1356	973-1101 300-700	$4{,}86\cdot10^{-5}\exp(-183/RT)$ $1\cdot10^{-11}\exp(-5/RT)$
Fe α, вакансії γ, вакансії α, міжвуз. атоми (c=1/2000)	1808	784-1017 1173-1473 300-900	$1{,}54\cdot10^{-3}\exp(-289/RT)$ $4\cdot10^{-6}\exp(-255/RT)$ $3\cdot10^{-11}\exp(-11/RT)$
Mo (ОЦК)	2890	1773-2173	$1{,}3\cdot10^{-5}\exp(-401/RT)$
Ni (ГЦК)	1726	1173-1473	$2{,}2\cdot10^{-4}\exp(-289/RT)$
Nb (ОЦК)	2741	1173-2673	$1{,}9\cdot10^{-4}\exp(-410/RT)$
Co (ГПУ→ГЦК при 690 К)	1768	1330-1579	$2{,}2\cdot10^{-4}\exp(-295/RT)$

Примітка: В таблиці E у кДж/моль. Якщо підставити R=0,00831, тоді D отримаємо в (м^2/с).

Для вакансійного механізму при самодифузії E[кал/моль]≈$34*T_{пл}$[К], або $E=15\lambda$, тобто теплота плавлення, помножена на число атомів в групі атомів, що втрачають стабільність під час стрибку атому (1 кал = 4,184 Дж). Енергія активації самодифузії заліза при наявності міжвузлових атомів у концентрації 1:2000 E=11000 Дж/моль = 0,11 еВ, $D_0 \approx 3\cdot10^{-11}$ м^2/с, для міді E= 0,05 еВ, $D_0 \approx 1\cdot10^{-11}$. При необхідності порівняння з даними, отриманими за умов іншої концентрації дефектів c_2, потрібно врахувати концентраційну залежність коефіцієнтів:

$$D_2 = \frac{c_2}{c_1} D_1 = D_{01} \frac{c_2}{c_1} \exp(-\frac{E^m}{kT}),$$

де D_1 і D_{01} – значення D і D_0 для концентрації c_1.

Для моделювання нескінченого зразка використовуються періодичні граничні умови. Для розрахунку коефіцієнтів дифузії потрібно обчислити квадрати переміщень Δ кожного з N атомів $\Delta_i^2 = \Delta x_i^2 + \Delta y_i^2 + \Delta z_i^2$ за час t:

$$D_{cp} = \frac{1}{N \cdot 6t} \sum_N \Delta^2$$

Вказівка: щоб не враховувати зсувів атомів від положень рівноваги за рахунок теплових коливань, підсумовування зсувів відбувається тільки в тому випадку, якщо величина зсуву атома перевищує половину міжатомної відстані, наприклад для ОЦК ґрат це $\sqrt{3/16}$ від періоду ґратки і $\sqrt{2/16}$ для ГЦК. Атоми можуть зникати і з'являтися на гранях через періодичні граничні умови. Тому від зсувів, більше половини розміру зразка, віднімають розмір зразку. Врахувати, що D не відразу стає постійною величиною, рис. 6.1.

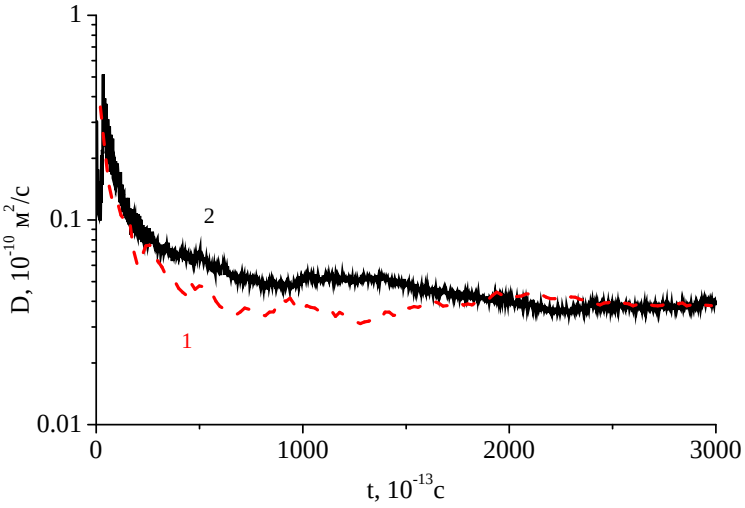


Рис. 6.1. Значення коефіциента самодифузії в залізі для значень кроку в часі: 1) 0,1; 2) 0,01 від періода коливань атомів. T= 700 К за наявності МА у концентрації 1:2000. [1]

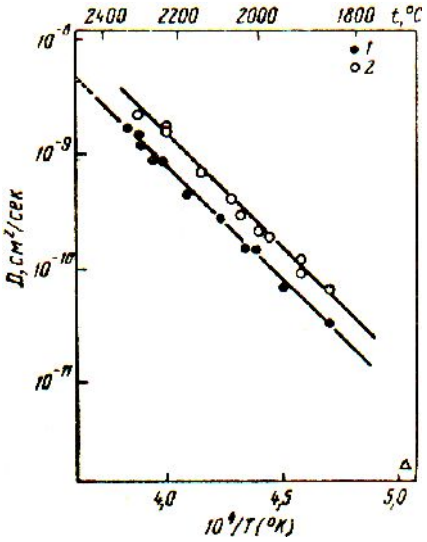


Рис. 6.2. Значення коефіциента самодифузії за вакансійним механізмом в молібдені. 1- моно, 2 – полікристал. [2].

4. Методика вирішення експериментального завдання

Моделювання кристала з дефектами за певної температури дає можливість визначати координати всіх атомів і знайти переміщення атомів за певний час за рахунок дифузії, відокремлюючи їх від теплових коливань атомів поблизу положень рівноваги.

5. Устаткування, прилади та матеріали

Програми XMD, VMD, Exel, Origin.

6. Контрольні питання та завдання

1. Як побудувати ґратку металу.
2. Що таке періодичні умови, чому доцільно їх використовувати.
3. Що таке закон Ареніуса.
4. Як визначити енергію активації дифузії E, передекспоненційний множник D_0.
5. При яких температурах необхідно проводити дифузійні дослідження.
6. Види міжвузловин.
7. Що таке дифузія? Від яких факторів залежить її швидкість?
8. Фізичний зміст енергії активації і передекспоненційного множника.

7. Програма проведення експерименту

1. Створити кристал з 1000-2000 атомів з періодичними граничними умовами з одним власним міжвузловим атомом у міжвузлі. Матеріал: Al, Au, Cu, Fe, Mo, Ni, Nb, Co.
2. Витримати зразок приблизно 10000 кроків для релаксації при низькій температурі, 3-10K. Плавно підняти температуру до 0,3$T_{плавл}$. В VMD проаналізувати рух МА.
3. Розрахувати зміну координат всіх атомів за час, у 100 – 1000 разів більший за період коливань атомів.
4. Знайти коефіцієнти дифузії при наступних температурах: 1)0,3 2)0,5 3)0,7$T_{плавл}$.

Приклад стартового коду:

```
read    Mo.txt
# Make repeating box and lattice (in units of a0)
box 5 5 5
particle 2
   1   0.0     0.0     0.0
   1   0.5     0.5     0.5
dup 4   1 0 0
dup 4   0 1 0
dup 4   0 0 1
# Scale up to units of angstroms (3.1472 unit cell) for Mo
scale 3.1472
# Set adiabtic simulation at starting temperature of 500K
calc T=500
clamp T
# PARTICLE [ADD] np = interstitial atom
 Particle ADD 1
1 5.5 5.5 5.5
# Set particle masses (in atomic mass units)
select all
mass MASSMo
# --------
repeat 20
       cmd 500
```

```
    WRITE FILE +position.txt sel particle
    WRITE PDB +pos_all.pdb
End
```

8. Опрацювання результатів експерименту

1. Побудувати графік *ln(D) =f(1/T)*, як на рис.6.2.
2. Оцінити D_0 і енергію активації міграції міжвузлового атома з рівняння Ареніуса.
3. Порівняти D, D_0 і E з літературними даними і з енергією активації за вакансійним механізмом.
4. Пояснити, чому не досліджуємо кристал з меншого числа атомів?

Література

1. Філатов О. В. Міграція атомів при ударній деформації ідеальних металевих кристалів. Автореф. дис. … докт. ф.-м. наук: 01.04.13 / Ін-т металофізики, - К., 2005, 32 с.
2. Askill J., Tomlin D.H. Phil. Mag., 1963, v.8 (90), p.997.
3. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах.– К.: Наукова думка, 1987. - 512 с.

Додаток

Правила розрахунків з наближеними числами

- Практично усі величини, використовувані в науці і техніці, є наближеними. Результат необхідно правильно округлювати, тому що представлення величини числом з великою кількістю цифр (які є на калькуляторі) викликає сумнів щодо грамотності студента.
- Число знаків у результаті, отриманому при вимірі, повинне вказувати на точність вимірів, передостання цифра повинна бути точної, а остання наближеною.
- При додаванні і відніманні, множенні і діленні зберігають у результаті стільки значущих цифр, скільки мається в числі, вимірюваному з найменшою точністю (значущі цифри відраховуються від першої ненульової ліворуч; наприклад, у числі 0,0123 три значущих цифри).
- При піднесенні в ступінь і добуванні кореня зберігають у результаті стільки значущих цифр, скільки їх мається у підкореневому числі.
- При логарифмуванні зберігають у мантисі стільки значущих цифр, скільки їх мається в логарифмованому числі.

Приклади позначення індексів:

вузли ґратки з індексами: [[111]]
індекс напрямку: [3 $\bar{1}$ 1]
індекс еквівалентних напрямків: <311>
індекси площини співпадають з індексами напрямку, перпендикулярного цій площині,
площина має індекси Міллера: (2 $\bar{3}$ 6)
сукупність площин: {236}

Координаційні числа ґраток:

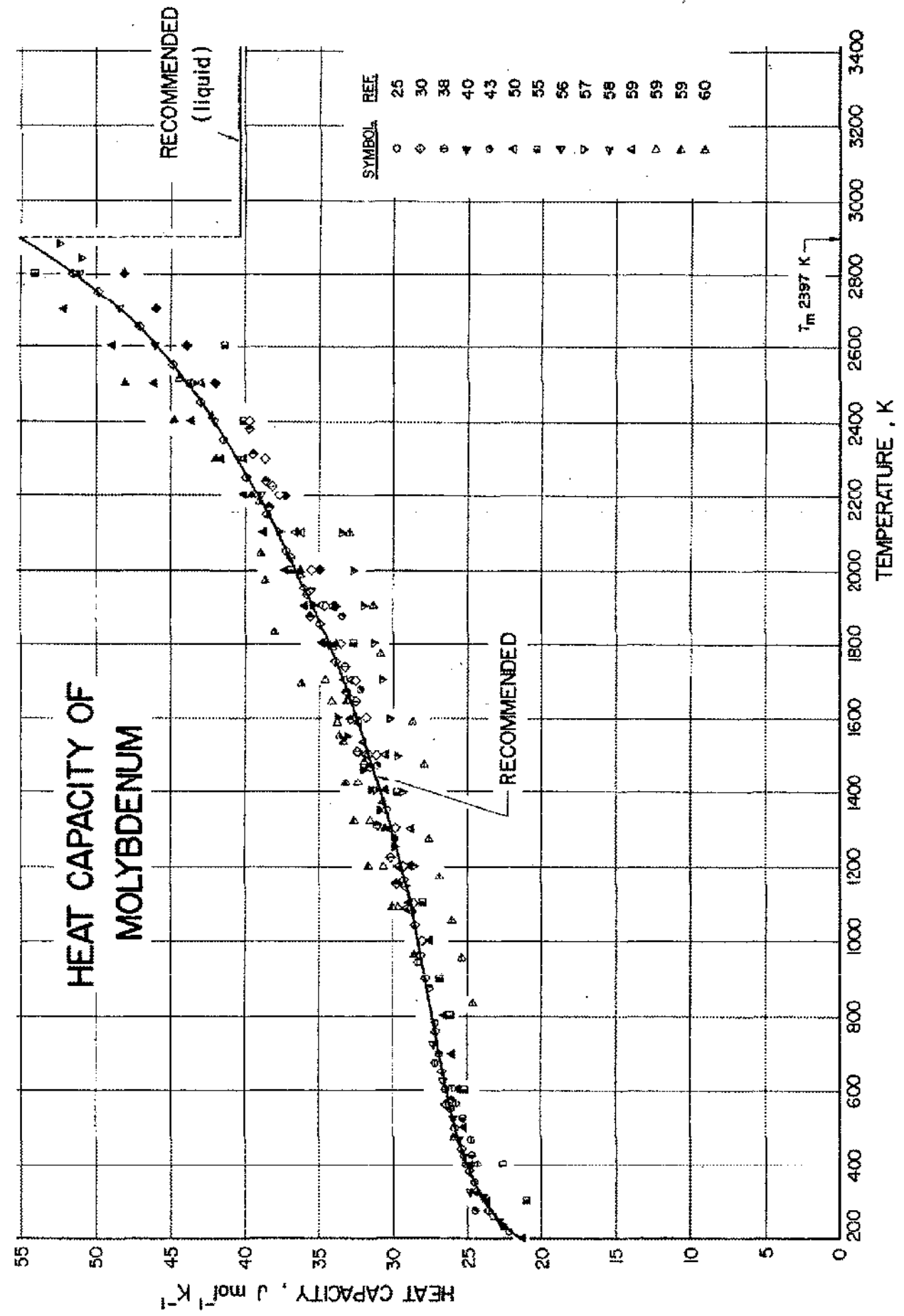
ОЦК: 8, 6, 12, 24, 8, 6,… на відстані 1, √(4/3), √(8/3), √(11/3), √(12/3), √(16/3) діаметра атома.
ГЦК: 12, 6, 16, 12, … на відстані 1, √2, √3, √4 діаметра атома.
ГЩП: 12, 6…
Ці числа можна розглядати як дискретний спектр функції радіального розподілу атомів.

Щільність пакування ґраток:

ОЦК: 0,68, ГЦК: 0,74

Деякі властивості металів

Метал, тип ґратки	$T_{пл}$, (К)	Густина (г/см^3)		C_p (Дж/гК)//Дж/(моль·К)		*E*, (ГПа)	Період ґратки (А)
		Тверд.	Рідина	Тверд.	Рідина		
Al (ГЦК)	933	2,7	2,375	0,9 // 24,2	1,19//	70	4,05
Au (ГЦК)	1337	19,3	17,31	0,128//25,4	~0,142//30	78	4,079
Ag (ГЦК)	1235	10,49	9,32	//25,35	//30,2	83	4,077
Cu (ГЦК),	1356	8,94	8,02	0,38//24,44	0,494//	123	3,615
Fe(α-ОЦК→ γ-ГЦК 1185К)	1808	7,87	6,98	0,44//25,10 //35	0,613//46,6	211	2,866 (3,656)
Mo (ОЦК)	2890	10,28	9,33	0,24//24,06	~0,5//40,3	322	3,147
Ni (ГЦК)	1726	8,91	7,81	0,44//26,07	0,63//	208	3,52
Nb (ОЦК)	2741	8,57		0,27//24,60	0,35//	105	3,307
Co (ГПУ→ ГЦК при 690К)	1768	8,9	8,86	0,42//24,81	0,9//	208	a=2,507, c=4,07. 3,354 (β)


HEAT CAPACITY OF MOLYBDENUM
RECOMMENDED (liquid)
RECOMMENDED
SYMBOL REF
25
30
38
40
43
50
55
56
57
58
59
59
59
60
T_m 2397 K
HEAT CAPACITY , J mol^{-1} K^{-1}
TEMPERATURE , K
0 200 400 600 800 1000 1200 1400 1600 1800 2000 2200 2400 2600 2800 3000 3200 3400
0 5 10 15 20 25 30 35 40 45 50 55