

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА
АТОМНОМ УРОВНЕ.
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ
ATOMISTIC SIMULATIONS IN
NANOCRYSTALLINE METALS.**

Борисова М.З., Яковлева С.П.
*Институт физико-технических
проблем Севера СО РАН*

Нанокристаллические металлические материалы обладают рядом уникальных свойств. Повышенные прочностные свойства наряду с сохранением пластичности этих материалов дают им неоспоримое преимущество перед обычными крупнозернистыми материалами. Это обусловлено масштабными эффектами, вызванным малым размером зерна и значительной долей границ зерен. В то время как в поликристаллических материалах, с размером зерна порядка нескольких мкм, пластическая деформация имеет дислокационную природу, в наноматериалах плотность дислокаций в объеме зерна крайне низка и большую роль при деформации играет зернограничная фаза.

Для понимания элементарных актов и механизмов развития пластической деформации в нанокристаллических материалах возможно применение компьютерного моделирования на атомном уровне высокой размерности. Для чистых материалов, для которых известны значения межатомного потенциала, проводится молекулярно-динамическое компьютерное моделирование, рассматривающее структуру на атомном уровне. Образцы разрабатываются с использованием стохастической процедуры, другими словами объем моделируемой ячейки заполняется нанозернами с произвольным расположением и ориентацией, в соответствии с конструкцией Воронова. Образцы содержат от $6 \cdot 10^6$ атомов, в зависимости от размера зерна (max. 20 нм) и от числа зерен (min. 125 зерен). При моделировании механических свойств наноматериалов согласуются внутризеренные (дислокационные) и межзеренные (зернограничное проскальзывание) механизмы деформации. При малых размерах зерна дислокации не могут войти в объем зерна из-за больших энергетических затрат, связанных с преодолением сил линейного натяжения. В образцах с размером зерен 12 нм и выше наблюдается аккомодационный механизм деформации: эмиссия и скольжение дислокаций. С увеличением размера зерна происходит смена основного механизма деформации – от зернограничного проскальзывания к дислокационному. Наиболее вероятным механизмом при низких температурах представляется зернограничное проскальзывание. Таким образом, задавая размер зерна и температуру испытания можно рассчитать напряжение те-

чения на определенной стадии процесса деформации. Моделирование на атомном уровне раскрывает связи структурных особенностей материалов с их механическими свойствами, позволяет предсказать и объяснить экспериментальные данные и дает новую почву для развития теоретических знаний о материи.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООБМЕНА
МИКРОЧАСТИЦЫ С
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ГАЗОВОЙ
СРЕДОЙ**

Бородин В.И., Трухачева В.А.
Петрозаводский государственный университет

Газодисперсные смеси широко используются как в обычных термических, так и плазменных технологиях, и расчет процессов теплообмена между частицами вводимого вещества и газовой фазой является необходимым этапом при разработке данных технологий. Однако, в литературе, в основном, обсуждаются вопросы, непосредственно связанные с нагревом частиц в Ньютоновском приближении теплообмена с использованием коэффициента теплоотдачи и не рассматриваются процессы изменения свойств среды (возмущение), окружающей частицу [1]. Однако, в ряде случаев, при рассмотрении тепло-, массо- и зарядообменных явлений в газодисперсной среде такая информация необходима.

В настоящей работе приводятся результаты расчетов изменения температурного поля вокруг частиц разного диаметра, помещенных в высокотемпературную среду аргона. При расчетах не учитывается движение частиц относительно плазмы. Данная ситуация имеет место в системах без потоков, а также в струях газа с мелкими частицами (диаметрами порядка или меньше 10 мкм для атмосферного давления), когда они за счет аэродинамической силы разгоняются практически до скорости струи.

При расчетах учитывались только кондуктивные тепловые потоки на частицу, что соответствует реальным тепловым потокам для среды с не слишком высокой температурой (например, для аргона порядка 7000 К), которые часто реализуются в плазмохимических процессах при косвенном нагреве от внешних генераторов плазмы. Не учитывались также заряженные частицы, роль которых в теплообмене при данных условиях мала [1]. Для выделения влияния чисто кондуктивного механизма теплообмена при расчетах частица считалась неиспаряющейся.

Расчеты проводились с использованием двух моделей для теплообмена: модель сплошной среды (континуальная модель) и непрерывно-дискретная модель, суть которой следующая.

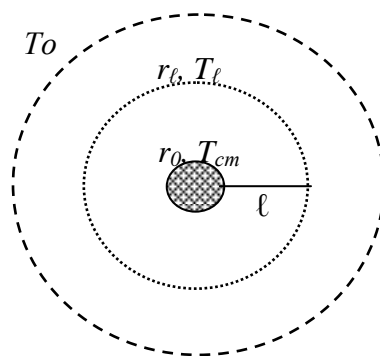


Рисунок 1. Частица

Выделим вокруг частицы концентрическую сферу радиусом $r_\ell = r_0 + \ell$, расположенную на расстоянии средней длины свободного пробега ℓ от поверхности частицы (рис. 1). На поверхность частицы попадают молекулы, испытавшие последнее столкновение с другими молекулами в слое ℓ . В качестве модели теплообмена частицы с окружающим газом при числе Кнудсена $Kn = \ell/d \geq 1$ (ℓ - длина свободного пробега молекул, d - диаметр частицы) была выбрана следующая непрерывно-дискретная модель (рис. 1): от бесконечности до радиуса r_ℓ (с температурой T_ℓ) использовалась модель сплошной среды, а в слое ℓ использовалась дискретная модель, где поток I молекул на частицу определялся формулой: $I = 4\pi \cdot r_0^2 \frac{n\bar{v}}{4}$

(n , \bar{v} - концентрация и средняя тепловая скорость молекул газа соответственно). При столкновении с поверхностью частицы молекулы газа отдают ей часть кинетической энергии равную $\chi \frac{3}{2} k(T_\ell - T_{cm})$, где χ - коэффициент аккомодации. Отвод энергии от частиц считался чисто радиационным.

Используя вышеуказанные модели, были рассчитаны температурные поля и другие теплообменные характеристики системы аргон - частица.

Типичный пример результатов расчетов температурных полей газа, окружающего частицы, при атмосферном давлении приведен на рис. 2.

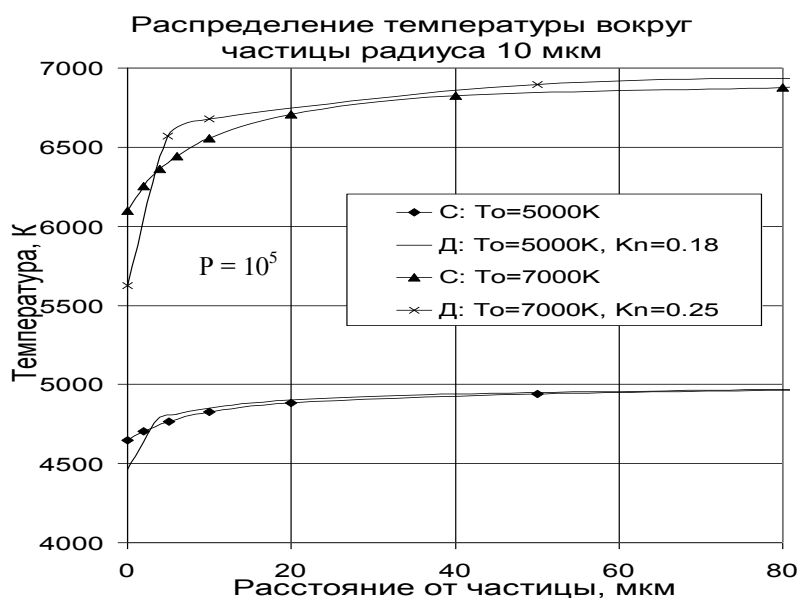


Рисунок 2. Результаты расчетов температурных полей газа

Результаты показывают, что вплоть до частиц размером 10 мкм имеет место большое возмущение исходного однородного температурного поля, причем это возмущение распространяется на расстояния, значительно превышающие размеры частиц. Данное возмущение практически исчезает при размерах частиц порядка и меньше 1 мкм.

Результаты расчетов по разным моделям хорошо совпадают при значениях $Kn \ll 1$, и расходятся при значениях $Kn \geq 1$, когда условие сплошности среды не выполняется и континуальную теорию теплообмена применять нельзя.

Результаты, полученные по непрерывно - дискретной модели, показывают, что мелкие частицы, для которых $Kn \geq 1$, не могут быть нагреты (причем

существенно) до температуры близкой к температуре окружающего газа, как это следует из континуальной теории теплопроводности. Связано это с тем, что, как показывают расчеты, реальные тепловые потоки на частицу, обусловленные потоком молекул газа, значительно меньше соответствующих потоков континуальной модели теплообмена.

С уменьшением давления газа критерий Kl увеличивается при прочих равных условиях, область применения модели сплошной среды сужается, но зато увеличивается верхний размер частиц, не возмущающих температурное поле окружающего газа. Так если при $P = 1$ атм, таковой размер был порядка 1 мкм, то при давлении $P = 0.1$ атм он увеличился практически до 10 мкм, то есть примерно прямо пропорционально значению Kl .

Уменьшение давления газа приводит к существенному уменьшению тепловых потоков на частицу и к степени ее нагрева. Для мелких частиц, когда они практически не возмущают температурное поле газа, разность (скачек) температур между стенкой и газом сосредоточена в пристеночном слое толщиной, равной средней длине свободного пробега молекул газа, где нет равновесия и где неправомерно вводить такую характеристику как температура газа.

Исследования, описанные в данной работе, были проведены в рамках проекта PZ-013-02, поддерживаемого совместно Американским фондом гражданских исследований и развития (АФГИР), Министерством образования РФ и правительством Республики Карелия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Нанесение покрытий плазмой / В.В. Кудинов, П.Ю. Пекшев, В.Е. Белащенко и др. М.: Наука, 1990. 408 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ МОДИФИЦИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ХАТЧИНСОНА-РАЙТА

Брызгалов Е. В.
ПГУ

Попытки моделирования динамики популяций при ограниченных ресурсах предпринимались с середины 19 века. Впервые эффект запаздывания был учтен почти 100 лет спустя Хатчинсоном. Он модифицировал «классическое» уравнение Ферхюльста, а именно сомножитель, учитывающий наличие верхней границы популяции, вычисляется в некоторый предшествующий данному момент времени:

$$\frac{dN(t)}{dt} = r \left[1 - \frac{N(t-T)}{K} \right] N(t)$$

Уравнение, получившее название уравнения Хатчинсона-Райта имеет 2 равновесных состояния: 0 и K . Можно доказать, что первое состояние равновесия линейно неустойчиво, а второе линейно устойчиво при $rT < \pi/2$ и неустойчиво в противном случае. В частности, при $T=0$ уравнение (1) превращается в уравнение Ферхюльста, где K — устойчивое равновесное состояние.

Следующим шагом становится введение автором в модель параметрически изменяющегося биотического потенциала. Действительно, в природе большое влияние на процесс размножения оказывают сезонные факторы и пр. То есть мы можем записывать в модели биотический потенциал не как константу, а как функцию от времени:

$$r = r_0 + f(t)$$

Выбирая в качестве неизвестной функции гармоническую и учитывая, что изменение биотического потенциала не влияет на коэффициент внутривидовой конкуренции ($m=r/K$), получим:

$$\frac{dN(t)}{dt} = r \left[1 - \frac{r_0}{r} \frac{N(t-T)}{K} \right] N(t),$$

где $r = r_0 + A \sin(2\pi t/\tau)$

Очевидно, что исследование данной модели возможно лишь численно.

Следует отметить, что большинство современных математических пакетов (Maple и пр.) не позволяет непосредственно осуществлять исследование систем на основе уравнений с запаздывающим аргументом. Для изучения поведения данной системы была использована разработанная автором моделирующая среда «Model Designer», позволяющая описывать и исследовать широкий класс динамических систем, в том числе и с использованием отклоняющегося аргумента.

Решение полученного уравнения осуществлялось средой с использованием схемы Штермера 5-го порядка, в качестве начального условия было принято $N(t) = N_0$ для $-T < t \leq 0$.

Для определения и идентификации динамического режима известно достаточно большое число способов. «Model Designer» поддерживает возможности построения фазовых плоскостей и спектров Фурье. С их помощью можно достаточно легко разбить режимы на периодические, квазипериодические (сумма нескольких периодических движений, которая, вообще говоря, не является периодической) и аperiodические.

Исследование модели затрудняется наличием большого числа параметров (биотический потенциал, время запаздывания, емкость среды, амплитуда и период колебаний биотического потенциала). Соответственно, в работе не везде выделены области того или иного режима, а только приведены найденные режимы. Часть режимов обнаруживаются в рамках модели Хатчинсона-Райта ($A=0$).

Полагая время запаздывания равным нулю, мы получаем логистическую кривую. Увеличивая запаздывание, мы приходим к первой бифуркации — смене режима монотонного возрастания (затухания) на режим затухающих колебаний. Время этого запаздывания обратно пропорционально биотическому потенциалу: $rT \in (0.45, 0.5)$. При дальнейшем нарастании T , колебания становятся более явными. Частота их пропорциональна биотическому потенциалу и постоянна при постоянном наборе параметров, что подтверждает спектр. При $rT = \pi/2$ согласно теории наступает смена затухающих колебаний нарастающими, которые становятся более выраженными при увели-