

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ВОДОРОДА В ОЦК-РЕШЕТКЕ ЖЕЛЕЗА ПРИ ВЫСОКИХ СКОРОСТЯХ НАГРЕВА

Бурнышев И.Н., Бесогонов В.В.

Институт прикладной механики УрО РАН, Россия, 426067, г. Ижевск ул. Т. Барамзиной, 34  
E-mail: inburn@udman.ru, besog@udman.ru

Проблема взаимодействия водорода с металлическими материалами многогранна. Водород можно рассматривать и в качестве вредной примеси (водородное охрупчивание, замедленное разрушение, флокенообразование), и в качестве легирующего элемента (водородное пластифицирование, сплавы-накопители водорода). Присутствие этого химического элемента в металле может кардинальным образом изменить многие физические свойства материала [6]. В настоящее время интерес к поведению водорода в металлических материалах возрос в связи с развитием водородной энергетики, являющейся альтернативной существующим видам энергетики. Несмотря на огромное количество работ по изучению системы «водород-металл», остается больше вопросов, чем ответов. Многие работы носят экспериментальный характер и при этом полученные результаты характеризуются большим разбросом данных и не раскрывают природы многих процессов, обусловленных присутствием водорода в металле. В частности, существует большое многообразие режимов противифлокенной обработки, которые основаны чаще всего на практическом опыте и не всегда являются оптимальными. Разработанные математические модели касаются в основном вопросов диффузии водорода в чистых металлах и не всегда имеют точное аналитическое решение. В настоящей работе для описания поведения водорода в решетке  $\alpha$ -железа в широком диапазоне температур использован молекулярно-динамический метод моделирования. Расчеты выполнены применительно к процессам флокенообразования в сплавах железа. При моделировании предполагается, что ответственным за флокены является диффузионно-подвижный водород.

Разработан пакет программ (вычислительное ядро) для моделирования поведения атомов в кристаллической решетке методом молекулярной динамики и адаптирован для системы железо-водород. Программы позволяют использовать для расчета как парные, так и многочастичные потенциалы межатомного взаимодействия. Проблемным вопросом в этих расчетах были и остаются вопросы вычисления потенциалов взаимодействия между атомами [1-5]. В данной работе вычисление потенциалов межатомного взаимодействия выполнено на основе метода погруженного атома (МПА). В этом методе каждый атом рассматривается как примесь, погруженная в ансамбль, состоящий из всех оставшихся атомов. Энергия, необходимая для погружения атома, зависит только от электронной плотности в точке погружения, которая всегда определима.

Полная потенциальная энергия группы атомов рассчитывается как:

$$E = \sum_{i,j} \frac{1}{2} \cdot V(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i),$$
$$\rho_i = \sum_{i,j} \phi(r_{ij}),$$

где  $E$  — полная энергия взаимодействия группы атомов,  $V(r_{ij})$  — парный потенциал взаимодействия между атомами  $i$  и  $j$ ,  $F(\rho_i)$  — функция погружения  $i$ -го атома,  $\rho_i$  — электронная плотность создаваемая атомами системы в точке расположения  $i$ -го атома,

$\phi(r_{ij})$  — электронная плотность создаваемая атомом  $j$  в точке с координатами атома  $i$  как функции расстояния  $r_{ij}$  между ними.

Согласно [1, 2] потенциальные функции для системы Fe-Fe можно представить в виде:

$$V(r) = \sum_k a_k (ra_k - r)^3 H(ra_k - r),$$

$$\phi(r) = \sum_k b_k (rb_k - r)^3 H(rb_k - r),$$

$$F(\rho) = a + b\sqrt{\rho} + c\rho,$$

$$H(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

Потенциальные функции для системы H-H взяты в виде [1, 4]:

$$V(r) = (1 - r/2)^{2p_H} / r,$$

$$\phi(r) = 0,05 \cdot \exp(-0,54r / a_0^H) / (2\pi),$$

$$F(\rho) = b_1^H \rho + b_2^H + 1 / (b_3^H \rho + b_4^H),$$

Смешанные парные потенциалы для системы Fe-H определяются по формулам:

$$V_{Fe-C}(a^C + b^C r_{ij}) = j^C [V_{C-C}(c^C + d^C r_{ij}) + V_{Fe-Fe}(e^C + f^C r_{ij})]$$

Моделирование поведения водорода в кристалле железа с ОЦК-решеткой. проводили при циклических граничных условиях на кристалле размером 10x10x10 параметров решетки ОЦК-железа, количество атомов железа в кристалле - 2000. Расчет выполнен при постоянных значениях энергии, давления и постоянном временном шаге, равном  $1 \cdot 10^{-16}$  s. Принято, что скорости нагрева кристалла достигают  $1 \cdot 10^{14}$  °/s. Такие (и даже большие) скорости нагрева реализуются при воздействии мощных пикосекундных импульсов на поверхность кристалла с разогревом области воздействия до температур в сотни или около тысячи градусов.

В октапоры кристалла с координатами (5, 5, 2), (9.25, 9.25, 8), (9, 9, 8), (7, 7, 6), (7.25, 7.25, 6), (6.75, 6.75, 6), (7, 7, 10), (6.75, 6.75, 10), (7.25, 7.25, 10), (7, 7, 9.7) (координаты в размерах ячеек) помещаются атомы водорода. Таким образом, в первой октапоре помещен один атом водорода, во второй – два, в третьей - три, в четвертой – четыре атома. При температуре 0,01 К кристалл выдерживается в течении 15000 шагов ( $1,5 \cdot 10^{-12}$  s) с целью релаксации кристалла. Затем температура кристалла повышается до 600 К и расчет ведется до 489000 шага ( $4,89 \cdot 10^{-11}$  s). После 489000 шагов температуру повысили до T=900 К и расчет велся до 6004720 шага ( $6,00472 \cdot 10^{-10}$  s).

Расчет показал, что при температуре 0,1 К за  $10^6$  шагов ни один из атомов водорода в другие октапоры не перешел (рис. 1). При нагреве кристалла с большими скоростями до температуры 600 К атомы водорода образуют область, в которой появляются вакансии (рис. 2). В последующем в этой области скапливаются атомы водорода из близлежащих октапор (рис. 3) и данная система остается устойчивой в смысле того, что атомы водорода не диффундируют в другие области кристалла. После нагрева кристалла с 600 К до 900 К водород начал диффундировать в другие области кристалла и к 6004720 шагу распределился по всему объему (рис.4).

Согласно выполненным расчетам «рассасывание» областей повышенной концентрации водорода и, следовательно, интенсивное удаление водорода из металла происходят при

температурах 900 К и выше, что хорошо согласуется с температурными режимами противоблокованной термообработки сталей.

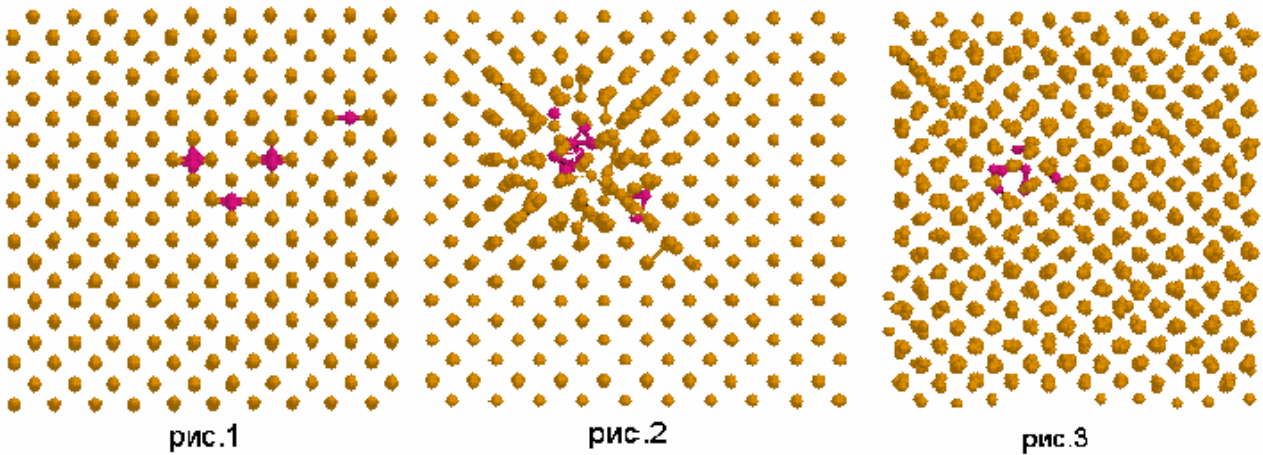


Рис. 1-3.

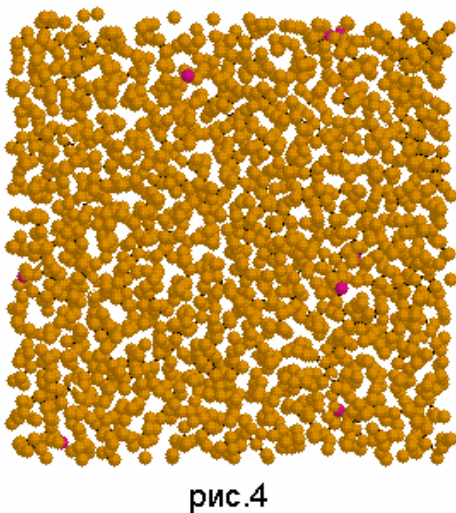


Рис. 1 – кристалл при температуре 0,1 К;  
Рис. 2 - кристалл при температуре 600 К в начальный момент нагрева;  
Рис. 3 - кристалл при температуре 600 К в стабилизированном состоянии;  
Рис. 4 - кристалл при температуре 900 К.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект 04-01-96020)

### Список литературы

- [1] M. Ruda, D. Farkas, J. Abriata. Phys. Rev. b, 1 october 1996-II volume 54, number 14.
- [2] G. Simonelli, R. Pasianot, E. J. Savino. Phys. Rev. b, 1 july 1994-II volume 50, number 2.
- [3] J. Wallenius, P. Olsson, C. Lagerstedt, N. Sandberg, R. Chakarova, and V. Pontikis. Phys. Rev. b, 69, 2004.
- [4] M. S. Daw, M. I. Baskes. Phys. Rev. b, 15 june 1984, volume 29, number 12.
- [5] M. Ruda, D. Farkas, J. Abriata. Scripta Materialia 46 (2002) 349–355
- [6] Гельд П.В., Рябов Р.А. Водород в металлах и сплавах. М., «Металлургия», 1974.