

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СВОБОДНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ И ГРАНИЦ РАЗДЕЛА НА ПРОЦЕСС ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ НАНОСТРУКТУР

И.Ф. Головнев, Е.И. Головнева, В.М. Фомин

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им.С.А.Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск, Россия

Введение. Настоящая работа направлена на решение фундаментальной проблемы – на изучение роли свободных поверхностей в процессах зарождения и переноса дефектов, развитии пластической деформации, зарождении трещин и дальнейшем разрушении материалов на микроуровне. Подробное исследование данной проблемы позволит обосновать теоретическую базу трех основных принципов физической мезомеханики [1]: а). поверхностные слои твердых тел являются самостоятельным мезомасштабным уровнем деформации, определяющим первичное зарождение деформационных дефектов; б). на внутренних границах раздела формируются концентраторы напряжения, определяющие распространение пластических сдвигов и зарождение трещин в объеме деформируемого твердого тела; в). поверхностные слои и внутренние границы раздела контролируют развитие процессов массопереноса в нагруженном твердом теле.

Для решения этой фундаментальной проблемы решалась конкретная задача – детализированное исследование динамических процессов в системах поверхностных и объемных атомов в металлической наноструктуре, вызванное движением одной из границ с постоянной скоростью. При этом поверхностные слои рассматривались как самостоятельные подсистемы атомов [2] в соответствии с основными положениями физической мезомеханики.

Физико-математическая модель. Иллюстрация разрушения твердотельной наноструктуры приведена для медного кластера, имеющего форму прямоугольного параллелепипеда, размеры которого составляли $50 \times 5 \times 5$ кристаллических ячеек вдоль осей координат XYZ, соответственно. Выбрана ориентация кристалла (1,0,0) для большей ясности получаемых результатов. Для описания межатомного взаимодействия использовался многочастичный потенциал Воутера [3]. Далее, с помощью метода искусственной вязкости [4] были получены начальные условия.

Граничные условия моделировались следующим образом. Атомы крайних граней, перпендикулярных оси X, помещались в гармонический потенциал, имеющий вид:

$$V(\vec{r}_i) = \frac{k}{2} (x_i - x_i^0 - v_0 t)^2$$

Здесь x_i^0 - координата i – го атома грани после охлаждения. На левой грани скорость v_0 полагалась равной нулю, а на правой грани являлась контролируемым внешним параметром. Боковые границы были свободными.

Скорость движения свободной (правой) границы изменялась от 10 м/с до 500 м/с, что позволило моделировать скорости относительного удлинения в интервале от 10^8 до 10^{10} с^{-1} для выбранного интервала размеров структуры.

В работе был использован мезоанализ [5] для нахождения распределения механических и энергетических характеристик по кристаллу в любой момент времени.

Результаты. Наиболее удобно место и время разрушения определить по макрохарактеристикам, т.к. на них отражается состояние всего кристалла в каждый момент времени. Общий вид всей наноструктуры в плоскости XZ на больших временах позволяет точно сделать вывод о месте разрушения. На рис.1, 2 результаты представлены для скорости движения 150 м/с. Волна отражается от неподвижного зажима, возвращается на подвижный зажим, что вызывает там разрушение структуры. На этом фрагменте отчетливо видны полосы Людерса – Чернова.

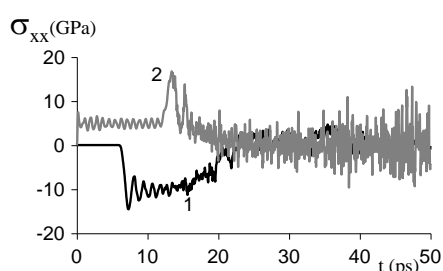


Рис.1 Зависимость напряжения на зажимах от времени. 1 – неподвижный (левый) зажим, 2 – подвижный (правый) зажим $v_0 = 150 \text{ м/с}$

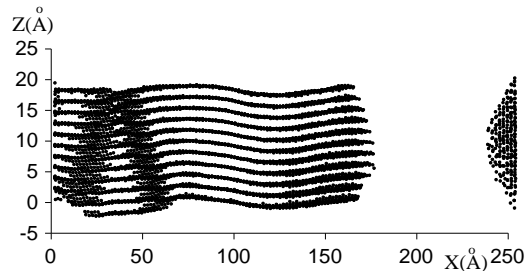


Рис.2 Вид наноструктуры в плоскости XZ в момент $t = 50 \text{ пс}$. Скорость движения границы $v_0 = 150 \text{ м/с}$.

Детализированное исследование на мезоуровне показало, что максимальное значение напряжения в крайних мезоэлементах совпадает с достаточной точностью с напряжением на зажимах, и ниже для иллюстрации везде будет приводиться именно последняя величина.

Количественный анализ был проведен для всего интервала скоростей и на рис.3 приведена зависимость критических значений напряжения и соответствующих локальных деформаций от скорости движения правого зажима.

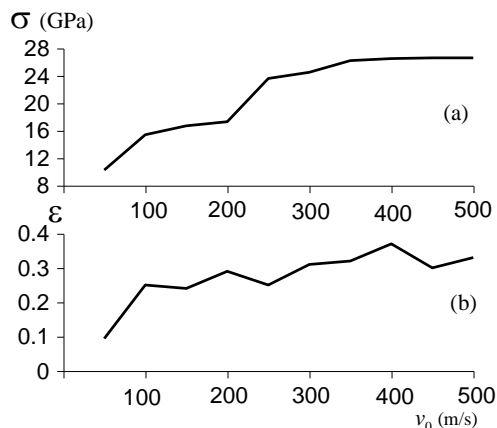


Рис.3 Зависимость (а) – критического напряжения (ГПа) и (б) – величины локальной деформации в разрушающейся мезоэлементах от скорости подвижного зажима.

Однако, анализ результатов показывает, что в отличие от напряжений, критическое значение локальных деформаций нельзя объявлять локальным критерием разрушения.

Зависимость внешней силы со стороны неподвижного зажима и изменения полной потенциальной энергии от времени позволили выделить важные моменты времени повреждения и разрушения кристалла (рис.4).

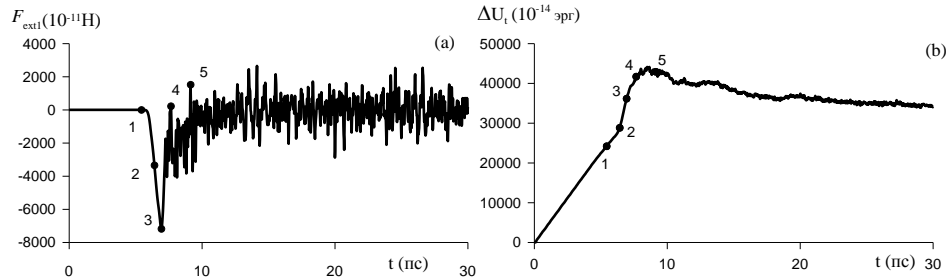


Рис.4 Зависимость внешней силы со стороны неподвижного зажима (а) и изменения полной потенциальной энергии (б) от времени (пс). Скорость движения свободной границы 300 м/с. 1 – 5.44 пс, 2 – 6.42 пс, 3 – 6.94 пс, 4 – 7.66 пс, 5 – 9.14 пс.

Распределение напряжений по кристаллу в выделенные моменты времени для поверхностных атомов и атомов объема показало, что напряжение в поверхностной системе примерно в два раза больше, чем в объемной части структуры..

Мезоанализ заполнения ячеек атомами (для 300 м/с) со временем показал, что в момент 6.94 пс во второй мезоячейке происходит разрушение поверхностной системы атомов. Далее возникают интенсивные потоки атомов между ячейками, а в момент $t=12.5$ пс в девятой мезоячейке появилась «трещина» и в объемной части ($x_v = 0$). Далее сплошная трещина разрастается и в момент времени 13.2 пс достигает трех мезоячеек (рис.5). В связи с этим данное время можно считать моментом окончательного разрушения.

Таким образом, хотя трещина зародилась в поверхностной системе атомов, но разрушение началось в тех мезоячейках, где трещина образовалась в объемной части, а поверхностные атомы обеспечили поток массы из ячеек разрушения.

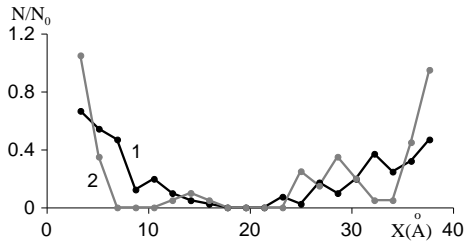


Рис.5 Распределение относительного количества атомов в мезоячейках. 1 – объемные, 2 – поверхностные. Момент времени $t=13.2$ пс.

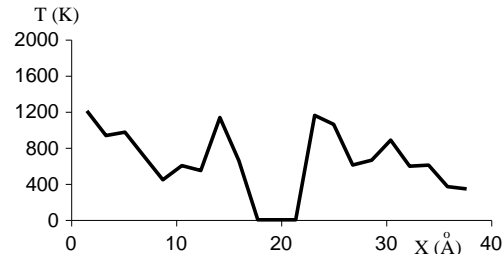


Рис.6 Распределение температуры вещества по кристаллу в момент времени 13.2 пс (фрагменты кристалла не взаимодействуют между собой).

Динамику разрушения отчетливо характеризует и распределение температур по мезоячейкам, полученное усреднением по объемным и поверхностным атомам (рис.6). В момент наибольшей нагрузки на зажим (6.94 пс) температура выросла до 100 К и к моменту окончания пластического сдвига (точка «5» – 9.14 пс) достигла 2000 К в мезоячейках, где образовалась трещина в поверхностных атомах. Далее до появления трещины в объемных атомах (12.5 пс) за счет теплопередачи температура снизилась до 1200 К. Примерно та же картина сохраняется до окончательного момента разрушения структуры (13.2 пс).

Выводы. В результате исследований одноосного растяжения идеальной металлической кристаллической структуры с постоянной скоростью деформации показано, что:

1. Разрушение наблюдается у одного из зажимов, либо, при высоких скоростях – около двух зажимов.
2. При высоких скоростях деформации можно выделить локальный критерий разрушения: при превышении локального напряжения некоторого критического значения (для меди 26 ГПа) структура разрушается.
3. Локального критерия разрушения по величине деформации для высоких скоростей движения свободной границы кристалла нет.
4. Напряжение в системе поверхностных атомов примерно в три раза выше напряжения в объеме.
5. Разрушение начинается с поверхности – в неподвижных мезоячейках первыми исчезают поверхностные атомы. Поверхность первой обеспечивает поток вещества из области разрушения.
6. Сплошная трещина формируется в той мезоячейке, где первой сформировалась трещина в объемной части.
7. В ячейках разрушения температура вещества повышается до температуры плавления.
8. Время разрушения структуры указанных размеров, длиной порядка 180 Å, составляет около 6 пс.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 11-01-00594-а и N 14-01-00465 и Программы фундаментальных исследований ОЭММПУ РАН № 12 «Многоуровневое исследование свойств и поведения перспективных материалов для современных узлов трения».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Панин В.Е., Сергеев В.П., Панин А.В.** Наноструктурирование поверхностных слоев конструкционных материалов и нанесение наноструктурных покрытий. Томск: Изд-во Том. Политех. Ун-та, -2009. – 285 с. – с.9)
2. **Головнева Е.И., Головнев И.Ф., Фомин В.М.** Особенности применения методов механики сплошных сред для описания наноструктур // Физическая мезомеханика – 2005. – Т.8. – N.5. - С.47-54.
3. **Voter A.F.** Embedded Atom Method Potentials for Seven FCC Metals: Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au, and Al //Los Alamos Unclassified Technical Report LA-UR-93-3901.
4. **Golovnev I.F., Golovneva E.I., Fomin V.M.** Simulation of quasi-static processes in the crystals by molecular dynamics method. // Physical mesomechanics. –2003. -V.6. –N.5-6. - pp.41-45.
5. **Головнев И.Ф., Головнева Е.И., Мерзиевский Л.А., Фомин В.М., Панин В.Е.** Молекулярно-динамическое исследование кластерной структуры и свойств ротационной волны в твердотельных наноструктурах // Физическая мезомеханика. – 2014. – Т.17. –№ 4. – с. 41-48.