Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тверской государственный университет»
Кафедра теоретической физики

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 2

ТВЕРЬ 2010

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145
ББК Ж36:Г5+В379
Ф50

Рецензенты:
Доктор технических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации, проректор по научной работе Тверского государственного технического университета
В.А. Тихомиров
Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики пьезо- и сегнетоэлектриков Тверского государственного университета
Н.Н. Большакова

Редакционная коллегия:
Самсонов Владимир Михайлович – заведующий кафедрой теоретической физики ТвГУ, профессор, д.ф.-м.н. (ответственный редактор);
Созаев Виктор Адыгеевич – заведующий кафедрой физики факультета электронной техники Северо-Кавказского горно-металлургического института, профессор, д.ф.-м.н.;
Гафнер Юрий Яковлевич – заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Хакасского государственного университета, профессор, д.ф.-м.н.;
Сдобняков Николай Юрьевич – доцент, к.ф.-м.н. (зам. ответственного редактора, ответственный секретарь);
Базулев Анатолий Николаевич – доцент, к.ф.-м.н.;
Комаров Павел Вячеславович – доцент, к.ф.-м.н.;
Скопич Виктор Леонидович – доцент, к.ф.-м.н.

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2010. – Вып. 2. – 168 с.

ISBN 978-5-7609-0560-4

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области физики межфазных явлений и нанонауки, включая нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей вузов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре теоретической физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145
ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-0560-4

© Коллектив авторов, 2010
© Тверской государственный университет, 2010

УДК 539.531, 539.22

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АТОМНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРЫ СПЛАВА

Е.А. Дудник, Д.В. Дудник, М.А. Скоробогатов, С.А. Черненок

Рубцовский индустриальный институт (филиал) Алтайского государственного технического университета им. И.И.Ползунова, Рубцовск, 658207, ул.Тракторная,2/6, evgdudnik@yandex.ru

В настоящей работе с помощью компьютерного эксперимента моделируется процесс интенсивной пластической деформации для исследования особенностей формируемых наноструктурных состояний и их эволюции при нагреве и деформации. Исследуется влияние особенностей микроструктуры на прочностные свойства сплава, выявлена роль атомного упорядочения на механизмы интенсивной пластической деформации сплава.

Методы интенсивной пластической деформации могут быть успешно использованы для получения наноструктур в различных металлах и сплавах и соответственно принципиально изменять свойства материалов [1]. Наноструктуры характеризуются не только очень малым размером зерен, высокими внутренними напряжениями, специфической кристаллографической текстурой, а также зачастую изменением фазового состава.

Формирование наноструктур происходит за счет измельчения микроструктуры сплава до наноразмеров методом интенсивной пластической деформации, например, в результате холодной прокатки или вытяжки [2]. Однако полученные структуры являются обычно ячеистыми структурами или субструктурами, имеющими границы с малоугловыми разориентировками. Вместе с тем наибольший интерес вызывают наноструктуры, содержащие преимущественно большеугловые границы зерен [3]. Методами интенсивной пластической деформации можно достичь очень больших деформаций при относительно низких температурах в условиях высоких приложенных давлений и сформировать наноструктурное состояние, которое связано с присутствием дислокаций и дисклинаций, а так же наличием больших упругих искажений кристаллической решетки.

Для исследования данных проблем в настоящее время широко используется имитационное моделирование. Секрет успеха вычислительных экспериментов заключается в разработке модели, которая достаточно детализирована, чтобы точно воспроизвести важные физические эффекты и сделать расчеты [4-6].

Целью данной работы является: методом имитационного моделирования исследовать особенности процесса интенсивной

пластической деформации, формирование наноструктурных состояний и влияние атомного порядка.

Методика эксперимента

Объектом исследования является модельный сплав Ni_3Al. Сплав обладает ГЦК решеткой, причем сплав стехиометрического состава в полностью упорядоченном состоянии имеет сверхструктуру Li_2, а в неупорядоченном – структуру Al. Имитационное моделирование проводилось с использованием атомистической модели исследования. В качестве описания межатомных взаимодействий выбран многочастичный потенциал Клери-Розатта [7].

С помощью компьютерного эксперимента формировалось наноструктурное состояние сплава и затем в процессе наноиндентирования определялись основные свойства сплава. На первом этапе сплав подвергался интенсивной пластической деформации в процессе экструзии, на втором исследовалась структура сплава, рассчитывались энергетические и прочностные характеристики методом наноиндентирования.

Вычислительный эксперимент реализует прослеживание пути системы в sN-мерном фазовом пространстве G, где s – число степеней свободы каждого из N атомов системы.

Начальное состояние определяется набором координат и скоростей $\{x_i, v_i; i = 1,..., N\}$ атомов в момент времени $t = 0$. Сила записывается в виде:

$$F_i = \sum_{j \neq i} F_{ij} + F_i^{ext} \qquad (1)$$

где F_{ij} - сила, с которой частица j действует на частицу i; F_i^{ext} – внешняя сила.

Потенциальная энергия ψ_i частицы может описываться аналогично в терминах попарно аддитивных потенциалов φ_{ij}:

$$\psi_i = \sum_{j \neq i} \varphi_{ij} + \psi_i^{ext} \qquad (2)$$

Сила равняется взятому с обратным знаком градиенту потенциальной энергии в пространстве G: $F = -градиент\,\psi$.

$$F_i = F(x)\Big|_{x=x_i},\ \psi_i = \psi(x)\Big|_{x=x_i} \qquad (3)$$

Описание физических систем завершается заданием граничных условий и уравнений движения. Граничные условия определяют внешние

силы и объем расчетной области. Движение атомов описывается с помощью уравнений динамики Ньютона:

$$\begin{gathered}\frac{dx_i}{dt}=v_{ix};\frac{dy_i}{dt}=v_{iy};\frac{dz_i}{dt}=v_{iz};\\ \frac{dv_{ix}}{dt}=\frac{F_{ix}}{m};\frac{dv_{iy}}{dt}=\frac{F_{iy}}{m};\frac{dv_{iz}}{dt}=\frac{F_{iz}}{m};\end{gathered}, \tag{4}$$

где $i=1,\ldots,N$ - номера атомов, $v_{jx},v_{jy},v_{jz},F_{jx},F_{jy},F_{jz}$ – соответствуют проекциям величин на оси прямоугольных декартовых координат OX, OY и OZ.

Для системы дифференциальных уравнений с заданными начальными и граничными условиями модифицированным методом Эйлера численно находится частное решение. Температура определяется через среднеквадратичную скорость атомов по распределению Максвелла – Больцмана, и в случае превышения заданной температуры проводилась соответствующая нормировка скоростей атомов для корректировки погрешностей вычислений и получения решения с заданной точностью.

Описание коррелированных систем на языке статистической механики, пригодное для проведения вычислительных экспериментов, основанных на атомистических моделях, формально задается уравнением непрерывности Лиувилля для плотности вероятности ρ в пространстве G:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_{i=1}^{N}v_i\cdot\frac{\partial\rho}{\partial x_i}+\sum_{i=1}^{N}\frac{F_i}{m_i}\cdot\frac{\partial\rho}{\partial v_i}=0, \tag{5}$$

где $\rho(x_1\ldots x_N,v_1\ldots v_N)dx_1\ldots dx_n dv_1\ldots dv_N$ есть вероятность того, что i-частица находится в объеме $[(x_{i,}\,x_i+dx_i)\ldots]$ в пространстве G в момент времени t.

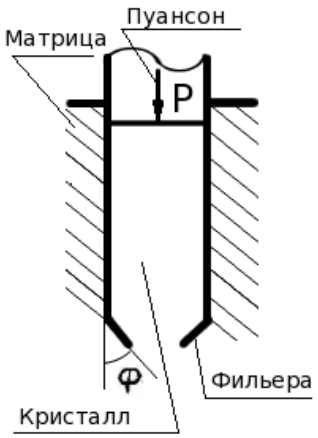


Рис. 1. Схема проведения компьютерного эксперимента. Вид краевых условий – заштрихованная область

Размер расчетного блока варьировался в пределах 32x32x32 ÷ 48x48x48 атомов. Краевые условия представляют собой матрицу в виде трубы с квадратным отверстием, соединенную с усеченной пирамидой в нижней части (рис. 1).

При деформации пуансон оказывал непосредственное давление на обрабатываемый сплав, который моделировался при помощи двух слоев атомов этого же кристалла.

В начальный момент времени определяются координаты и скорости атомов: начальные положения атомов соответствуют узлам г.ц.к. решетки, начальные скорости атомов полагаются равными нулю, угол фильеры равным 30°. Хотя угол велик по сравнению с экспериментальными результатами, но это ускоряет процесс фрагментации сплава при экструзии и позволяет выявить особенности структуры и механизмов данного процесса.

Для расчета прочностных характеристик сплава использовался метод наноиндентирования по Викерсу, индентор представлял собой четырехгранную пирамиду с внутренним углом 68º. Перемещение наноиндентора определяли по формуле [8]:

$$\Delta h = \left(V + \left(F - F_{ax} \right) \cdot \frac{\Delta t}{M} \right) \cdot \Delta t \qquad (6)$$

где F – нагрузка, F_{ax} – сила, действующая со стороны модельной области, V – скорость наноиндентора, M – масса наноиндентора. Силу F_{ax} находили как проекцию суммы всех сил, действующих со стороны атомов на наноиндентор за промежуток времени dt.

Для расчета твердости по Виккерсу используется следующая формула:

$$HV = 0,069 \frac{N^2 P}{h^2} \qquad (7)$$

Параметр N определяли по диаграмме внедрения из соотношения:

$$N = \frac{h}{h_e} \left[1 + 1,35 \left(\frac{h}{h_e} - 1 \right) \right]^{-1} \qquad (8)$$

где h – глубина внедрения индентора, h_e – величина упруго-восстановленного отпечатка.

Метод молекулярной динамики позволяет моделировать детальную микроскопическую картину подвижности атомов внутри кристалла. Исследовались особенности наноструктуры сплава после фрагментации. Для описания наноструктурного состояния сплава использованы понятия домена, межфазных границ. Доменом будем называть область кристалла, в которой отклонения положения атома из узла решетки не превышают

$0{,}8\mathring{A}$, что составляет порядка 20% от параметра решетки. Сверхструктурный порядок доменов определялся числом связей пар атомов на первой координационной сфере, которое соответствует числу пар упорядоченной фазы A_3B. Поверхность раздела между двумя доменами определим как межфазную границу.

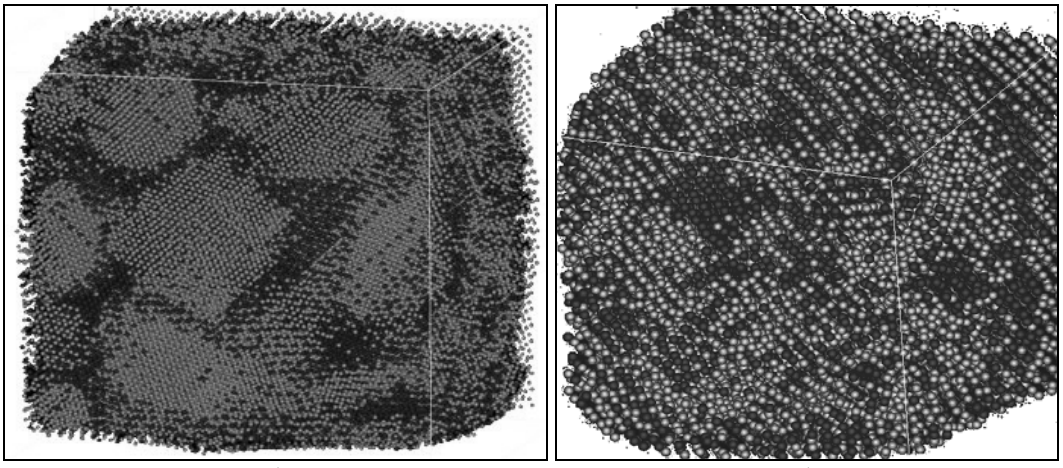
Результаты и их обсуждения

Для исследования процесса фрагментации модельного сплава в процессе экструзии был проведен компьютерный эксперимент по следующей схеме. На первом шаге формировались два типа стартовых блока кристалла, в виде полностью упорядоченного и разупорядоченного состояний. Затем запускался метод молекулярной динамики моделировался процесс экструзии сплава как из упорядоченного так и из неупорядоченного состояния, угол фильеры задавался равным 10º, 30º. Верхний предел допустимой температуры 400К, по достижению которого проводилась нормировка скоростей атомов, соответствующая температуре 200К.

На втором этапе проводилось исследование влияния атомного упорядочения сплава на особенности фрагментации структуры сплава.

На последнем этапе моделировался процесс наноиндентирования, который использовался для определения прочностных свойств сплава после воздействия метода интенсивной пластической деформации.

В процессе первого этапа компьютерного эксперимента из исходной конфигурации, сплав был полностью упорядочен(см. рис. 2,а).



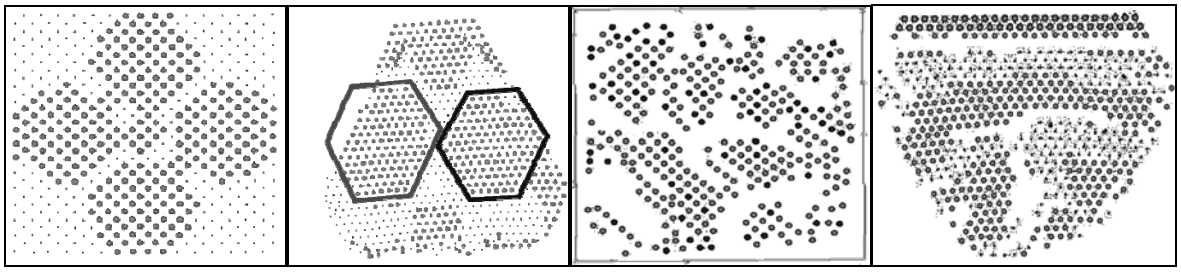
а) б)

Рис. 2. Картины фрагментации кристалла Ni_3Al в объемном формате, полученные из стартового упорядоченного состояния (а) и неупорядоченного состояния (б), угол фильеры 30˚. Светлым цветом окрашены домены с правильным расположением атомов, темным межфазная граница.

Расчетная ячейка содержала 48x48x48 атомов. В результате эксперимента в структуре модельного упорядоченного сплава Ni_3Al под действием деформации образовались домены округлой формы и равных размеров во всей области кристалла, модельное время составляло 20пс. После процесса экструзии были получены картины распределения отклонения атомов из узлов решетки более чем $0,8\text{Å}$.

Стартуя из неупорядоченного состояния сплава, в результате интенсивной пластической деформации получена картина неоднородной фрагментации сплава, домены имеют различную форму и размер. Расчетная ячейка модельного сплава составляла 32x32x32 атомов, модельное время составляло 46пс (рис.2,б).

Исследование особенностей наноструктуры по атомным плоскостям (001) и (111) показало, что влияние атомного порядка в сплаве играет важную роль в процессе фрагментации, определяет форма и размер доменов (рис.3).



а) б) в) г)

Рис. 3. Картины фрагментации кристалла в случае исходного упорядоченного кристалла в атомных плоскостях (001) (а) и (111) (б), для неупорядоченного кристалла (в), (г) – соответственно.

Методом наноиндентирования была измерена твердость по Виккерсу, оказалось, что упорядоченный сплав Ni_3Al до проведения экструзии имеет твердость порядка 5,4 отн.ед., в неупорядоченном составляет 8.4 отн.ед., после эксперимента значение твердости повышается в упорядоченном изначально сплаве до 30,7 отн.ед. и в неупорядоченном до 30,5 отн.ед.

Упорядоченный сплав имеет наноструктуру однородного характера равномерно распределенных доменов в области кристалла, что свидетельствует об устойчивости полученных новых свойств сплава в результате процесса экструзии.

Библиографический список

1. *Валиев, Р.З.* Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией / Р.З. Валиев, И.В. Александров. – М.: Логос, 2000. – 272 с.
2. *Андриевский, Р.А.* Прочность наноструктур / Р.А. Андриевский, Глезер А.М. // УФН. – 2009. – № 179. – с. 337.
3. *Головин, Ю.И.* Определение комплекса механических свойств материалов в нанообъемах методами наноиндентирования / Ю.И. Головин, В.И. Иволгин, В.В Коренков., Н.В Коренкова., Р.И.Рябко // Конденсированный среды и межфазные границы. – 2001. – Т. 3. – № 2. – С. 122-135.
4. *Milman, Yu.V.* Mechanical properties, indentation and dynamic yield stress of ceramic targets / Yu.V. Milman, S.I. Chugunova // Int. J. Impact Engin. – 1999. – V. 23. – № 23. – P. 629-638.
5. *Скоробогатов, М.С.* Моделирование процесса интенсивной пластической деформации в сплаве Ni3Al (111) / М.С. Скоробогатов, Д.В. Дудник, Е.А. Дудник // Вестник тамбовского университета. Серия: естественные и технические науки, 2010. – Т.15. – Вып. 3-2. – С. 1247-1252.
6. *Черненок, С.А.* Исследование прочностных свойств сплава Ni3Al методом наноиндентирования / С.А. Черненок, Д.В. Дудник, Е.А. Дудник // Вестник тамбовского университета. Серия: естественные и технические науки, 2010. – Т. 15. – Вып. 3-2. – С. 1265-1268.
7. *Cleri, F., Rosato V.* Tight-binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // Phys. Rev. B. –1993. – V. 48. – P. 22-33.
8. *Мачихин В.Б., Арзамасцев А.А.* Двухмерная модель структуры материала в процессе наноиндентирования // Электронный журнал «Исследовано в России». – 2003. – Т. 6. – С. 2267-2277. http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2003/190.pdf.