

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНОАКТИВИРУЕМЫХ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

Никонов А.Ю.^{1,2,3}

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия (634021, г. Томск, пр. Академический, 2/4), e-mail: nikonov@usgroups.com

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36)

³Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия (634050, г. Томск, пр. Ленина, 30)

С помощью метода молекулярной динамики в работе проведено исследование поведения материала в условиях нагружения, идентичных процессу сварки трением с перемешиванием. Нагружение моделировалось путём задания выбранной части образца («инструменту») постоянных значений угловой и поступательной скоростей движения. Рассматривались изначально бездефектный кристаллит меди и кристаллиты меди и железа, находящиеся в контакте. Обнаружено, что движение «инструмента» приводит к разрушению кристаллической структуры образца и последующему перемешиванию атомов сопряжённых кристаллитов. Показано, что при определённых режимах нагружения кристаллическая решётка после прохождения «инструмента» может восстанавливаться, сохраняя регулярный порядок. Анализ структуры показал, что происходит взаимный процесс внедрения с последующим замещением атомами узлов противоположного кристаллита. В случае моделирования кристаллитов меди и железа наблюдается аналогичный результат – атомы меди встраиваются в ОЦК решётку железа и наоборот. Полученные результаты могут быть использованы для понимания процессов, протекающих в условиях механоактивируемой диффузии.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, механоактивация, сдвиговая деформация.

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF MECHANOACTIVATION DIFFUSION PROCESSES

Nikonov A.Y.^{1,2,3}

¹Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, Russia (634021, Tomsk, Akademicheskyy pr. 2/4), e-mail: nikonov@usgroups.com

²National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia (634050, Tomsk, pr.Lenina, 30)

³National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia (634050, Tomsk, pr. Lenina, 30)

In the work investigation of the behavior of the material under loading conditions identical to the process of friction stir welding carried out using the method of molecular dynamics. The loading was modeled by setting to the selected part of the sample ("tool") constant values of angular and translational velocities. Initially defect-free crystal of copper and copper and iron crystallites in contact considered. It is found that movement of "tool" leads to destruction of the crystal structure of the sample and following mixing of atoms of conjugate crystallites. It is shown that under certain loading conditions the crystal lattice after the passage of the "tool" can be restored by keeping a regular order. Structure analysis showed that there is a mutual process of implementation followed by substituting sites by atoms of opposite crystallite. In case of simulation of copper and iron crystallites observed a similar result - copper atoms embedded in the bcc iron lattice and vice versa. Obtained results can be used to understand the processes occurring in the conditions of mechanoactivated diffusion.

Keywords: method of molecular dynamics, mechanical activation, shear strain.

Технология механического ускорения реализации различных физических и химических процессов известна уже более 100 лет. Она активно используется в современной науке и промышленности для повышения эффективности протекания химических реакций и физико-механических процессов в условиях комбинирования нормального давления и сдвиговой деформации. Наиболее распространённым способом механоактивируемого воздействия на

материал является проведение механической активации в шаровых мельницах [1]. В частности, такое воздействие может существенно ускорить протекание реакции самораспространяющегося высокотемпературного синтеза в порошковых средах. Ещё одним примером практического использования эффекта ускорения протекания диффузионных процессов за счёт механоактивации является технология сварки трением с перемешиванием (СТП). СТП является относительно новым методом получения неразъёмных соединений материалов за счёт ускорения процессов диффузии и механического перемешивания материалов вдоль области шва. Так, в работе [10] показано, что структура сварного шва, полученного методом СТП, сформировалась в результате пластического течения и интенсивного массопереноса материала, обусловленного вращением инструмента.

В последнее время направление исследований, связанное с механической активацией протекания различных процессов, становится особенно актуальным при переходе на масштабы отдельных атомов, когда появляется возможность контролировать атомную структуру и получать наноматериалы с качественно новыми физико-химическими и механическими свойствами. Ввиду очевидных пространственных и временных ограничений использования экспериментальных методов изучения компьютерное моделирование может являться эффективным инструментом исследования механики и физики процессов, протекающих в условиях механической активации. Отметим, что поскольку механоактивируемые процессы неразрывно связаны с интенсивным формированием несплошностей, генерацией дефектов структуры различного уровня, переносом масс, то наиболее предпочтительным является использование методов дискретного описания моделируемой среды [2–6]. Таким образом, целью настоящей работы является анализ атомных механизмов, протекающих в результате механоактивируемых диффузионных процессов, с использованием моделирования методом молекулярной динамики.

Численная модель процесса

Схематическое изображение моделируемого образца приведено на рисунке 1. С целью изучения реализации возможных атомных механизмов в условиях нагружения, идентичных процессу сварки трением с перемешиванием, в работе моделировалось движение вращающегося абсолютно жёсткого цилиндра вдоль поверхности сопряжения двух кристаллитов. Исследования проводились в рамках метода молекулярной динамики с использованием программного пакета LAMMPS [2; 8]. Взаимодействие описывалось в рамках метода погруженного атома [6; 9]. Данный многочастичный потенциал хорошо зарекомендовал себя при решении различных задач описания деформации металлических кластеров и структур на кристаллической основе [7–9]. Размеры кристаллитов двух металлов (*Me1* и *Me2*) составляли $10,8 \times 21,7 \times 2,9$ нм. Образец состоял из 72000 атомов. В качестве

вращающегося инструмента была выбрана группа атомов, образующая цилиндр диаметром 3,6 нм с осью вдоль оси Z, как показано на рисунке 1. Данные атомы вращались с постоянной угловой скоростью ω вокруг оси цилиндра, дополнительно вся система двигалась поступательно как целое со скоростью V. Уравнения движения интегрировались с шагом по времени $\Delta t=0,001$ пс.

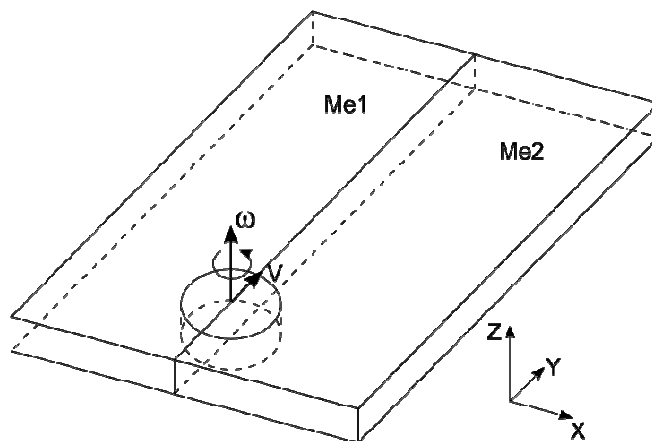


Рис. 1. Схематическое изображение моделируемого образца.

Результаты моделирования

Первоначально моделировался процесс, воспроизводящий на атомном масштабе условия нагружения, реализуемые при сварке трением с перемешиванием двух идеальных кристаллитов меди. Скорости вращения и движения инструмента были выбраны $V=50$ м/с и $\omega=0,1$ пс⁻¹. Отвод тепла из образца был реализован за счёт введения искусственной вязкости для атомов, принадлежащих двум буферным слоям по краям обоих фрагментов. Для учёта протяжённых размеров моделируемого образца во всех направлениях задавались периодические граничные условия.

Анализ структуры образца показал, что в результате прохода вращающегося инструмента в образце на стыке двух кристаллитов наблюдается перемешивание атомов, исходно принадлежащих различным фрагментам. На рис. 2а показана проекция атомов на плоскость X \circ Y в момент времени, соответствующий прохождению рабочего инструмента практически вдоль всей длины области сопряжения двух металлов. Различными оттенками серого цвета отмечены атомы, изначально принадлежащие кристаллитам Me1 и Me2. Видно, что след прохождения инструмента состоит из двух частей. Непосредственно за инструментом наблюдается зона нарушения кристаллической решётки. Атомы фрагментов Me1 и Me2 в ней присутствуют приблизительно в равных долях. Толщина этой зоны сопоставима с размерами вращающегося инструмента. При удалении инструмента на расстояние, сопоставимое с его диаметром, начинается область, в которой атомы в результате процесса релаксации занимают положения в узлах исходной кристаллической решётки. Особенностью этой области является градиентное расположение атомов

фрагментов *Me1* и *Me2*. Анализ структуры кристаллической решётки с применением алгоритма поиска локальной топологии атомных связей [6; 8] позволил выявить формирование структурных дефектов. Однако их объёмная доля по отношению к общему числу атомов ничтожно мала.

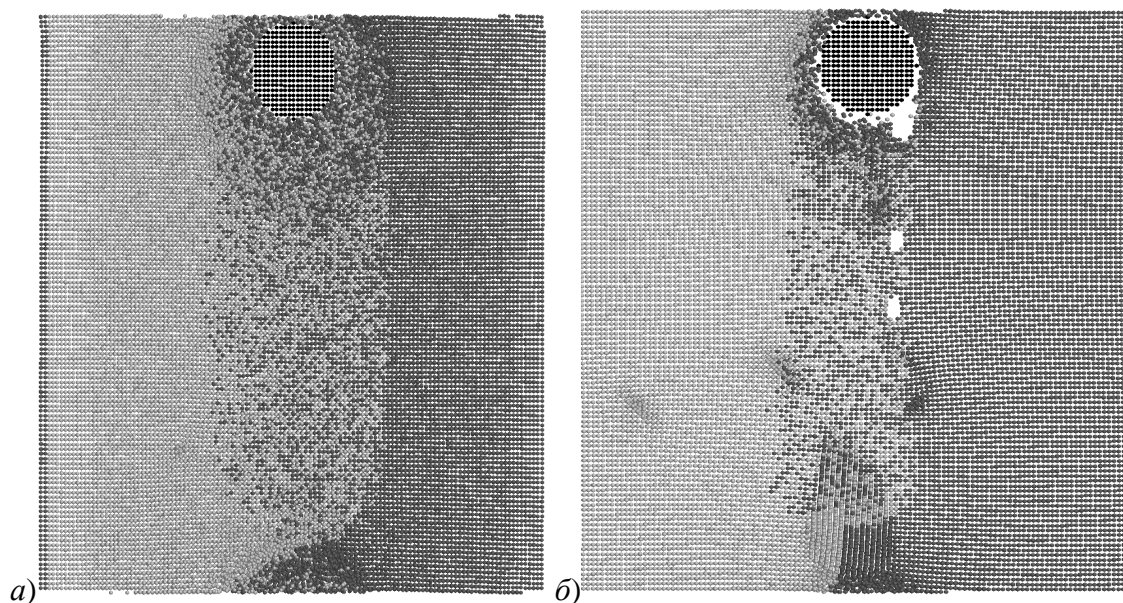


Рис. 2. Проекция атомов на плоскость HoY после прохода инструмента в сопряженной паре $Cu - Cu$ при различных скоростях движения инструмента: а) $V=50$ м/с и $\omega=0,1$ пс⁻¹; б) $V=100$ м/с и $\omega=0,1$ пс⁻¹.

При увеличении скорости движения инструмента по краю «следа» может образоваться ряд структурных дефектов в виде нанопор (рис. 2б). Результаты исследований показали, что результирующая структура атомной решётки в этом случае в зоне прохождения инструмента также соответствует ГЦК решётке. Отличительной особенностью такого «следа» является формирование большого числа дефектов структуры (вакансии, нанопоры, дислокации и дефекты упаковки). Момент формирования очередной нанопоры хорошо виден на представленном рисунке.

На следующем этапе исследований изучался процесс, воспроизводящий на атомном масштабе условия нагружения, реализуемые при сварке трением с перемешиванием кристаллитов Cu (*Me1*) и $\alpha-Fe$ (*Me2*). Вдоль направлений Y и Z моделировались периодические условия. В направлении X задавались жёсткие граничные условия. Как и в предыдущем случае, взаимодействие рассчитывалось с использованием модели метода погруженного атома. Размеры моделируемых фрагментов *Me1* и *Me2* были равны $21,7 \times 21,7 \times 2,9$ нм соответственно. Кристаллиты состояли из ≈ 120000 атомов каждый. Исходная кристаллографическая ориентация обоих кристаллитов была выбрана как $[100]$ $[010]$ и $[001]$ вдоль осей X , Y и Z лабораторной системы координат соответственно. Скорости инструмента были $V=50$ м/с, а $\omega=0,1$ пс⁻¹. Как и ранее, отвод тепла из образца был реализован

за счёт введения искусственной вязкости для атомов, принадлежащих двум буферным слоям, крайним по отношению к плоскости сопряжения обоих фрагментов.

Результаты моделирования показали, что после прохода вращающегося инструмента на границе раздела кристаллитов наблюдается формирование сложной конфигурации, где присутствует перемешивание атомов меди и железа (рис. 3а). Детальный анализ результирующей структуры показал, что вблизи исходной плоскости сопряжения произошло внедрение атомов меди в решётку α -Fe с замещением атомов в узлах ОЦК решётки, и наоборот, атомы железа заместили атомы Cu в ГЦК решётке (рис. 3б).

Как и ранее, наблюдается градиентный характер внедрения атомов обоих металлов, однако ширина этой зоны меньше в сравнении с результатами, полученными для сопряжённой пары Cu-Cu. Это может быть объяснено разницей типа кристаллической решётки обоих металлов. Этим же объясняется наличие множества дефектов структуры вдоль плоскости сопряжения, полученных после прохождения инструмента.

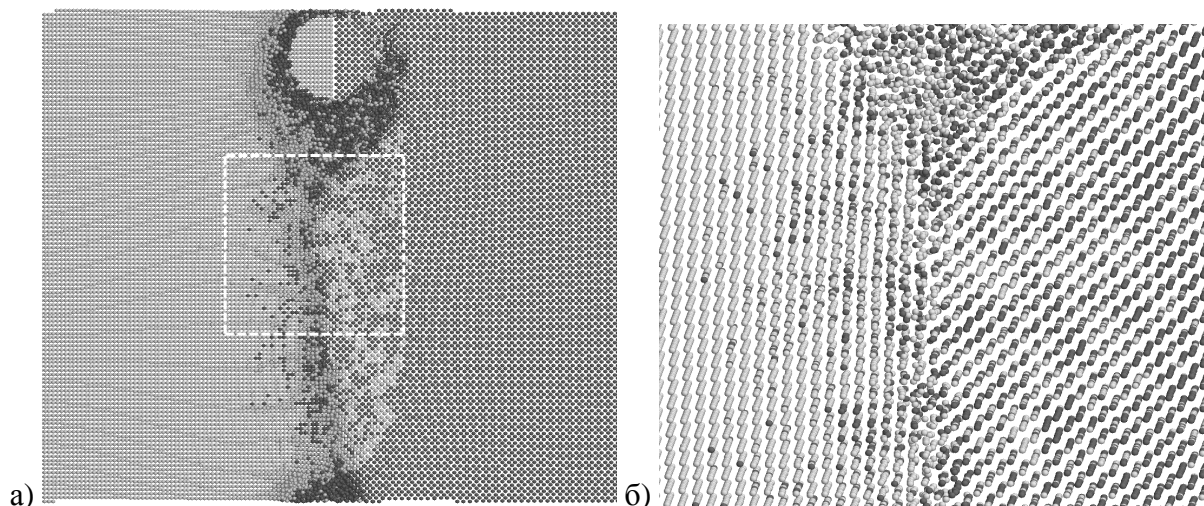


Рис. 3. Проекция атомов на плоскость ХоУ после прохода инструмента в сопряжённой паре Cu – α -Fe. Изображение (б) соответствует фрагменту, выделенному на рисунке (а).

Выводы

На основе представленных результатов исследования можно сделать следующие выводы. Несмотря на принципиальную разницу характерных пространственных и временных параметров, результаты компьютерного моделирования находятся в хорошем качественном согласии с данными экспериментальных исследований. Компьютерная модель может являться тестовой системой для понимания основных закономерностей формирования структурных неоднородностей, генерируемых в результате использования технологии сварки трением с перемешиванием. Полученные результаты моделирования также могут иметь важное практическое значение. Они позволяют выявить новые способы и механизмы получения неравновесных состояний в кристаллической решётке за счёт инициации процесса механически активируемой взаимной диффузии металлов на атомном уровне.

Работа выполнена по проекту № III.23.2.4 фундаментальных исследований СО РАН на 2013–2016 гг., при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (договор № 02.G25.31.0063) в рамках реализации Постановления Правительства РФ № 218 и грантов РФФИ № 14-08-31662 и РФФИ № 12-08-960а.

Список литературы

1. Григорьев М.В. Влияние механической обработки на структуру и свойства порошка нестехиометрического карбида титана / М.В. Григорьев, Л.М. Молчунова, С.П. Буйкова, С.Н. Кульков // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2013. – Т. 56, № 7/2. – С. 206-210.
2. Dmitriev A.I. Low-density layer formation and "lifting force" effect at micro- and meso-scale levels / A.I. Dmitriev et al. // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 2005. – Vol. 43, Issue 3. – P. 324-334.
3. Dmitriev A.I. A multilevel computer simulation of friction and wear by numerical methods of discrete mechanics and a phenomenological theory / A.I. Dmitriev et al. // Physical Mesomechanics. – 2009. – Vol. 12. – Issue 1-2. – P. 11-19.
4. Dmitriev A.I. Simulation of surface topography with the method of movable cellular automata / A.I. Dmitriev, V.L. Popov, S.G. Psakhie // Tribology International. – 2006. – Vol. 39, Issue 5. – P. 444-449.
5. Dmitriev A.I. Simulation of the behavior of a σ_5 grain boundary under combined thermal and external shear loading / A.I. Dmitriev, A.Y. Nikonov // Technical Physics Letters. – 2013. – Vol. 39, Issue 8. – P. 709-712.
6. Dynamic vortex defects in deformed material / S.G. Psakhie et al. // Physical Mesomechanics. – 2014. – Vol. 17, Issue 1. – P. 15-22.
7. Local structural transformations in the fcc lattice in various contact interaction. Molecular dynamics study / S.G. Psakhie et al. // Physical Mesomechanics. – 2012. – Vol. 15, Issue 3-4. – P. 147-154.
8. On structural defect generation induced by thermal fluctuations in materials with a perfect lattice under dynamic loading / S.G. Psakhie et al. // Physics Letters A. – 2006. – Vol. 349, Issue 6. – P. 509-512.
9. On the conditions of strain localization and microstructure fragmentation under high-rate loading / M.P. Bondar et al. // Physical Mesomechanics. – 2013. – Vol. 16, Issue 3. – P. 191-199.
10. Sizova O. Microstructure Features of Aluminum Alloys Welded Joint Obtained by Friction Stir Welding / O. Sizova et al. // Advanced Materials Research. – 2014. – Vol. 872. – P. 174-179.

Рецензенты:

Смолин А.Ю., д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник ИФПМ СО РАН, г. Томск;

Зольников К.П., д.ф.-м.н., главный научный сотрудник ИФПМ СО РАН, г. Томск.