УДК 539.386

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ КРИСТАЛЛИТА С МЕЖЗЕРЕННОЙ ГРАНИЦЕЙ В УСЛОВИЯХ ЛОКАЛЬНОГО СДВИГОВОГО НАГРУЖЕНИЯ

Дмитриев А.И.[1,2], Никонов А.Ю.[1,2], Скоробогатов А.С.[3], Кузнецов В.П.[3], Колубаев Е.А.[1,4]

[1]*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия (634021, Томск, пр. Академический 2/4), e-mail:dmitr@ispms.tsc.ru*
[2]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия (634050, Томск, пр. Ленина, 36)*
[3]*Курганский государственный университет, Курган, Россия (640669, Курган, ул. Гоголя, 25)*
[4]*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия (634050, Томск, пр. Ленина, 30)*

В работе с использованием метода молекулярной динамики проведено моделирование поведения кристаллита в условиях сдвигового динамического нагружения поверхностного слоя, обусловленного фрикционным контактом образца с микровыступом контртела. Нагружение задавалось движением жёсткого индентора вдоль поверхности кристаллита. Моделировались различные варианты: кристаллиты с исходно бездефектной структурой, содержащие границу зёрен специального типа Σ5 ориентированную вдоль и перпендикулярно направлению нагружения и с границей раздела материалов различного сорта. Анализировалось влияние исходной структуры на поведение кристаллита под нагрузкой. Обнаружено, что при внешнем воздействии в объёме образца возникает множество дефектов. Это приводит к развитию нанофрагментации поверхностного слоя. Исследованы атомные механизмы реализации процесса нанофрагментации. Показано, что наличие границы зёрен препятствует развитию дефектов в образце. Проведён анализ процессов, возникающих вблизи границы раздела между кристаллитами меди и железа.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, сдвиговая деформация.

SIMULATION OF BEHAVIOUR OF CRYSTALLITE WITH GRAIN BOUNDARY UNDER LOCAL SHEAR LOADING

Dmitriev A.I.[1,2], Nikonov A.Yu.[1,2], Skorobogatov A.S.[3], Kuznetsov V.P.[3], Kolubaev E.A.[1,4]

[1]*Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, Russia (634021, Tomsk, pr. Akademichesky 2/4)*
[2]*National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia (634050, Tomsk, pr.Lenina, 36)*
[3]*Kurgan State University, Kurgan, Russia (640669, Kurgan, ul.Gogolya, 25)*
[4]*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia (634050, Tomsk, pr. Lenina, 30)*

In this paper, simulation of the behavior of the crystallite under dynamic shear loading of the surface layer due to frictional contact of the sample with microprotrusion of counter-body was carried out using the method of molecular dynamics. The loading was set by the movement of hard indenter along the surface of the crystallite. Simulated various options: initially defect-free crystallites containing a tilt grain boundary Σ5 oriented parallel or perpendicular to the loading direction and with the interface of different sorts of materials. Analysis of the effect of the initial structure on the behavior of the crystallite under load was performed. Found that an external stress in the sample volume raises a lot of defects. This leads to development of nanofragmentation of surface layer. Atomic mechanisms of a process of fragmentation were investigated. It has been shown that the presence of grain boundaries prevents development of defects in the sample. The analysis of the processes occurring near the interface between the crystallites of copper and iron was performed.

Key words: method of molecular dynamics, shear strain.

Проблемы описания поведения материала вблизи границ раздела всегда привлекали к себе внимание механиков, материаловедов, специалистов в области физики и химии. Это обусловлено не только важностью расширения фундаментальных знаний, касающихся этой сложной междисциплинарной области исследований, но и значимостью их практических приложений, прежде всего в различных отраслях машиностроения. В работе проведено исследование процессов, протекающих вблизи свободной поверхности с исходной шероховатостью при контакте образца с микровыступом контртела. Известно, что в

условиях трения в зоне контактного взаимодействия реализуется множество процессов, включающих в себя деформацию, образование дефектов, структурные превращения и т.п. Экспериментальные исследования динамики подобных процессов очень сложны или невозможны. В связи с этим компьютерное моделирование может являться эффективным инструментом исследований. Поскольку фрикционный контакт сопровождается упругой и пластической деформацией, образованием дефектов структуры различного уровня, то предпочтительным является использовать дискретный подход моделирования [2–4,7,8]. Ранее аналогичные исследования были проведены для монокристаллов меди и альфа железа [6]. Было показано, что в поверхностном слое материала в условиях моделируемого типа нагружения развиваются многочисленные поверхностные дефекты. Установлено, что глубина проникновения дефектов и их концентрация связаны с размерами нагружаемой части микровыступа. Кроме того, было показано, что формирование дефектов в поверхностном слое приводит, в дальнейшем, к генерации отдельных зёрен, разориентированных по отношению друг к другу. Очевидно, что в реальности внутренняя структура материала далека от идеальной бездефектной структуры монокристаллов. Она содержит как множественные локальные структурные дефекты, так и большое количество границ раздела. Это особенно актуально вблизи свободной поверхности, когда появляется возможность структурной перестройки атомной решётки за счёт перераспределения избыточного объёма [3]. В настоящей работе с использованием молекулярно-динамического моделирования исследуется влияние внутренних границ раздела (границы зёрен и интерфейс разнородных материалов) на развитие структурных дефектов в объёме образца вблизи свободной поверхности с исходной шероховатостью при фрикционном контакте образца с микровыступом контртела. Рассматриваются различные варианты расположения межзёренной границы и интерфейса.

Численная модель процесса

Для моделирования в рамках метода молекулярной динамики использовался программный пакет LAMMPS, который позволяет эффективно использовать возможность распараллеливания вычислений [5,6]. В качестве моделируемого образца рассматривался кристаллит меди, содержащий плоскую внутреннюю границу раздела, которая в первой серии вычислений представляла собой межзёренную границу специального типа Σ5. Структура дефекта создавалась путём задания определённой ориентации кристаллической решётки для каждого из зёрен. Во второй серии вычислений граница раздела представляла собой интерфейс контактирующих металлов Cu-Fe. Исходная шероховатость в обоих случаях глубиной 2 нм задавалась путём удаления части атомов поверхностного слоя. Вдоль

направления Z задавались периодические граничные условия. Нижний слой атомов (рис.1) был неподвижным. Над слоем подложки моделировался специальный слой отвода тепла для имитации протяжённости образца по направлению оси Y. Взаимодействие между атомами описывалось в рамках метода погруженного атома. Выбор потенциала обусловлен возможностью с достаточно высокой точностью описывать упругие и поверхностные свойства, а также энергетические параметры системы [1,6].

В качестве микровыступа контртела использовался полевой индентор цилиндрической формы радиуса 4 нм и с осью, направленной вдоль оси Z. На атомы, попадающие внутрь области индентора, действовали силы по направлению от оси цилиндра. Величина силы описывается формулой $F(r) = -K(r-R)^2$, где K – константа, r – расстояние от центра цилиндра до атома и R – радиус цилиндра, при этом при r > R F(r) = 0.Скорость движения индентора в направлении X составляла 10 м/с. Индентор погружался в образец на глубину 3 нм.

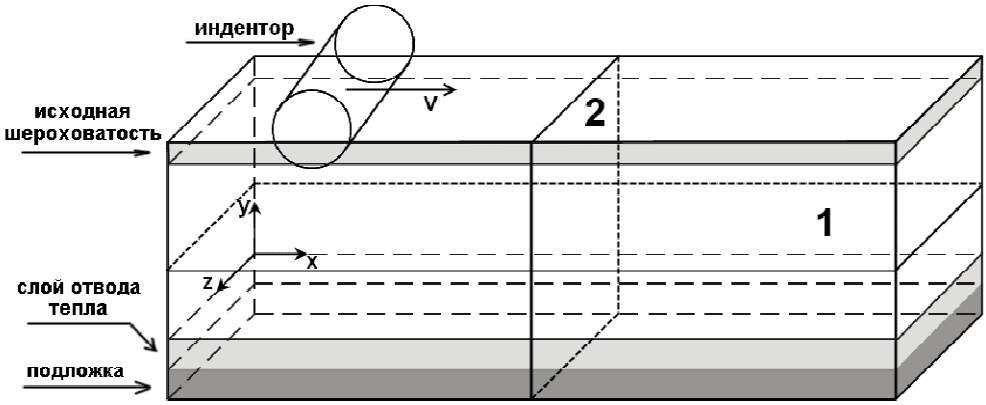


Рис. 1. Схематическое изображение моделируемого образца.

Поведение образца с границей зёрен специального типа

Первоначально рассматривался образец с границей зёрен типа Σ5, расположенной в плоскости XoZ в центре кристаллита (положение 1 на рис.1). Для анализа структуры кристаллической решётки применялся алгоритм поиска локальной топологии атомных связей [1,5,6], который позволяет выявить формирование структурных дефектов. Результаты моделирования показали, что вследствие движения микровыступа контртела в объёме зерна образуется множество дефектов упаковки. Присутствие межзёренной границы приводит к сдерживанию распространения дефектов в область соседнего зерна. Также было обнаружено, что в результате внешнего сдвигового нагружения граница зёрен начинает перемещаться в направлении, перпендикулярном плоскости дефекта. Данный эффект был исследован ранее и описан в [5]. Суть эффекта заключается в следующем. В условиях внешней сдвиговой деформации происходит достраивание атомных слоёв одного из зёрен, за счёт вовлечения

атомов, контактирующих с плоскостью границы и исходно принадлежащих противоположному зерну. Это приводит к росту одного из зёрен и перемещению границы. Анализ структуры в различные моменты времени показал, что движение границы происходит не единовременно. Движется только та часть границы, которая находится перед индентором. Это приводит к искривлению плоскости дефекта и выходу его на свободную поверхность. На рис. 2а показана проекция структуры образца на плоскость XoY в момент времени, когда граница зёрен под действием внешнего нагружения поднимается к поверхности. Видно, что дефекты структуры сосредоточены в верхней части образца, бывшей прежде единым зерном.

Для проверки влияния направления нагружения по отношению к структуре границы в работе моделировался образец, содержащий межзёренную границу специального типа Σ5, структура которой была зеркально отражена относительно плоскости дефекта по сравнению с описанным выше примером. На рис. 2б показана структура образца в тот же момент времени, что и на рис. 2а. Видно, что плоскость дефекта в этом случае менее искажена, а движение межзёренной границы в направлении перпендикулярном приложенной нагрузке ограничено влиянием атомов в подложке образца.

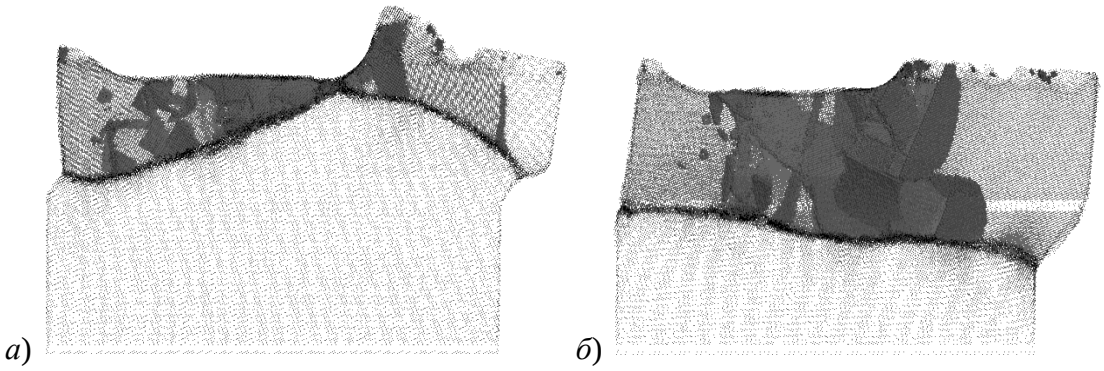


Рис. 2. Проекция атомов на плоскость XoY. Серыми крупными точками отмечены атомы с ГЦК структурой, чёрным – атомы, расположенные на поверхности и на границе зёрен.

На следующем этапе исследований генерировался образец, в котором граница зёрен была расположена параллельно плоскости YoZ (положение 2 на рис.1). Результаты моделирования показали, что при воздействии микровыступом перемещения границы вдоль оси Y не наблюдается. Граница, как и в предыдущем случае, препятствует распространению дефектов, но только до тех пор, пока микровыступ находится на достаточном расстоянии от границы (рис. 3). При приближении индентора к межзёренной границе дефекты упаковки возникают в обоих зёрнах образца.

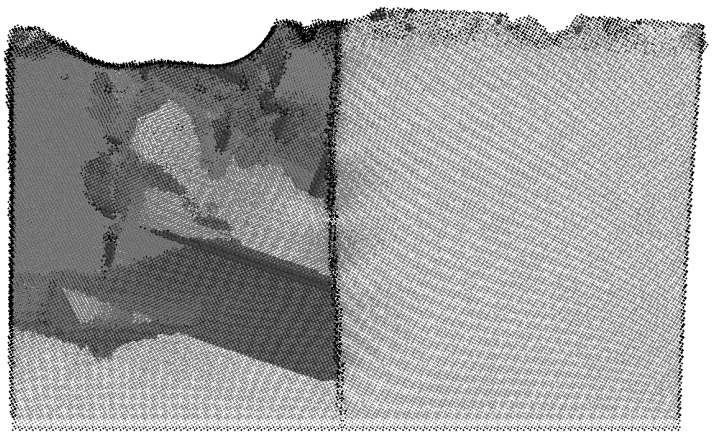


Рис. 3. Проекция атомов структуры с вертикальной границей зёрен на плоскость XoY.

Таким образом, с помощью компьютерного моделирования было показано, что наличие межзёренной границы в кристаллите ограничивает распространение дефектов в объём образца в условиях сдвигового нагружения и может приводить к рекристаллизации отдельных зёрен. Несмотря на то, что было исследовано только два предельных случая расположения границы зёрен в материале, можно предположить, что поведение кристаллита с дефектом, расположенного под произвольным углом к свободной поверхности является комбинацией процессов, протекающих в рассмотренных случаях.

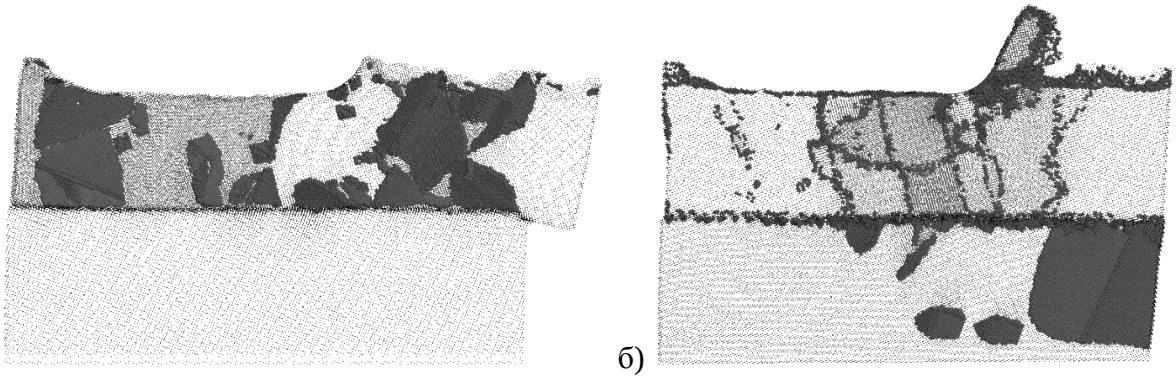
Поведение образца с границей раздела Cu-Fe.

Следующим этапом исследований было моделирование поведения образца, состоящего из металлов различного сорта в условиях сдвигового нагружения, вызванного движением микровыступа контртела. Рассматривалось плоское сопряжение исходно бездефектных кристаллитов меди и альфа-железа. Структура медной части образца совпадала со структурой кристаллита меди, рассмотренного ранее, когда межзёренная границы была ориентирована параллельно плоскости XoZ (положение 1 на рис.1). Кристаллографическая ориентация ОЦК кристаллита была зеркальным отражением относительно границы раздела ориентации медного фрагмента.

Первоначально рассматривался образец, в котором кристаллит альфа-железа был расположен вблизи подложки. Результаты моделирования показали, что вследствие воздействия микровыступа контртела структурные дефекты образуются только в кристаллите меди. Образование множества дефектов приводит к нанофрагментации медного фрагмента. На рис. 4а показана структура образца в момент времени 2нс. На рисунке мелкими точками отмечены атомы с ОЦК и ГЦК структурой. Крупными серыми – атомы с локальной ГПУ структурой. Чёрным – остальные атомы. Видно, что нарушения в структуре образуются только в кристаллите меди. Смещение части медного кристаллита за пределы

кристаллита железа обусловлено использованием свободных граничных условий вдоль направления сдвигового нагружения.

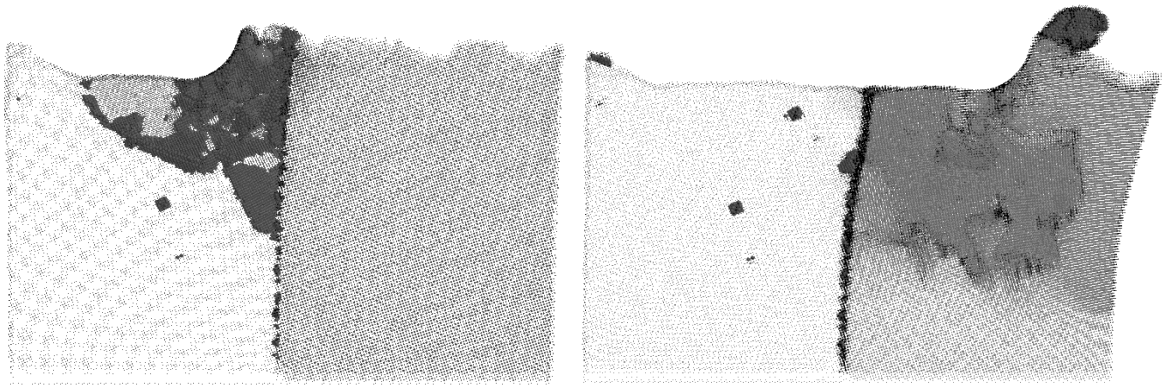
В случае, когда поверхность образца представляет собой кристаллит железа, а вблизи подложки расположен кристаллит меди, то первоначально дефекты образуются только в кристаллите железа. Однако при прохождении индентора возникшие напряжения в структуре приводят к образованию дефектов и в кристаллите меди. На рис. 4б показана структура исследуемого образца в момент времени 2нс. Здесь крупными точками отмечены не только атомы с ГПУ структурой, но и со структурой, близкой в ОЦК. Анализ кристаллической решётки вблизи таких атомов показал, что подобная структура наблюдается вблизи дислокаций в ОЦК решётках. Как и в случае с медью, возникновение дислокаций привело к образованию фрагментов, в которых ориентация кристаллической решётки отличается на 1-2 градуса. На рис. 4б этот фрагмент заметен в центре верхнего кристаллита.



а) б)

Рис. 4. Структура образца в момент времени t=2 нс. В образце верхний кристаллит состоит из атомов а) меди; б) железа.

В дальнейшем было также проведено моделирование образца с границей раздела, расположенной перпендикулярно свободной поверхности (положение 2 на рис.1). Кристаллиты располагались так, что сначала индентор проходил по поверхности меди, а затем по фрагменту железа. Результаты исследований показали, что, как и в случае с границей зёрен в меди, возникающие структурные дефекты не проходили через границу раздела. На рис. 5а показан образец в момент времени 0.9нс. Дефекты наблюдаются только в левой части образца. При приближении микровыступа контртела к границе раздела начинаются образовываться дефекты и в кристаллите железа. Отметим, что после снятия напряжений в меди, практически все дефекты аннигилируют. Это хорошо заметно на рис. 5б. Видно, что в кристаллите меди остались только незначительные области, где атомная структура отличается от ГЦК.



а) б)

Рисунок 5 Структура образца с вертикальной границей раздела в момент времени а) 0,9нс; б) 2,6нс.

Выводы

В качестве основных результатов можно выделить следующее:

– поведение кристаллита меди с межзёренной границей специального типа Σ5 в условиях локализованного сдвигового нагружения в целом идентично описанным ранее результатам [5]. При ориентации границы параллельно направлению нагружения в кристаллите может происходить перестройка атомной структуры вблизи плоскости дефекта, сопровождаемая перемещением положения границы в направлении, перпендикулярном нагружению. Отличие заключается в локализации сдвигового нагружения, что приводит к искривлению плоскости межзёренной границы.

– наличие межзёренной границы является сдерживающим фактором распространения структурных дефектов в пределах нагружаемого зерна, вызванные локализованной сдвиговой деформацией. Это справедливо как для межзёренной границы, расположенной параллельно направлению нагружения, так и при перпендикулярной ориентации границы.

– в случае моделирования интерфейса двух разносортных металлов возможность распространения дефектов в соседний кристаллит зависит от того, какой из материалов подвержен сдвиговой деформации. В случае легкоплавкого металла, структурные дефекты остаются локализованными в его объёме. В случае тугоплавкого металла, структурные дефекты могут распространяться и по другую сторону от внутренней границы раздела.

– результаты исследований могут быть использованы для понимания особенностей развития пластической деформации вблизи поверхности поликристаллических материалов.

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, 14-08-91330ННИО_а и 14-38-50423мол_нр.

Список литературы

1. Bondar M. P., Psakhie S. G., Dmitriev A. I., et al. // Physical Mesomechanics. – 2013. – Vol. 16. – Issue 3. – pp. 191-199.
2. Cundall P.A., Strack O.D.L. // Studies in Applied Mechanics. – 1983. – Vol. 7. – pp. 137-149.
3. Dmitriev A.I., Psakhie S.G. // Technical Physics Letters. – 2006. – Vol. 32. – Issue 8. – pp. 664-666.
4. Dmitriev A.I., Zolnikov K.P., Psakhie S.G. et al. // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 2005. – Vol. 43. – Issue 3. – pp. 324-334.
5. Dmitriev A.I., Nikonov A.Y., Psakhie S. G. // Physical Mesomechanics. – 2011. – Vol. 14. – Issue 1-2. – pp. 24-31.
6. Kuznetsov V.P., Nikonov A.Y., Dmitriev A.I. // Particle-Based Methods II: Fundamentals and Applications. – 2011. – pp. 891-898.
7. Luding. S. // Comptes Rendus Physique. – 2002. – Vol. 3.– Issue 2. – pp. 153-161.
8. Oesterle W., Dmitriev A.I., Kloss H. // Tribology Ineternational. – 2012. – Vol. 48. – pp. 128-136.

Рецензенты:

Смолин И.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.286972.