

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

На правах рукописи



Айш Мохаммед Махмуд Мохаммед

**Исследование особенностей деформации и разрушения
нановолокон металлов и сплавов в зависимости от их формы и
размеров**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Барнаул – 2014

Работа выполнена в ФГБОУ ВПО «**Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова**»

Научный руководитель: заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор,

Старостенков Михаил Дмитриевич.

Официальные
оппоненты:

Дмитриев Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук, ФГБУН «Институт проблем сверхпластичности металлов РАН», зав. лабораторией «Нелинейные явления и дефектные структуры в кристаллах»

Рудер Дадых Давыдович, кандидат физико-математических наук, доцент, ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет», доцент кафедры прикладной физики, электроники и информационной безопасности.

Ведущая организация: **Томский государственный архитектурно-строительный университет**, г. Томск

Защита состоится «__» июня 2014 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46., e-mail: veronika_65@mail.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

<http://www.altstu.ru>

Автореферат разослан «__» _____ 2014 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент



Романенко В.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Объектами нанотехнологий являются наночастицы, нанопорошки, нанотрубки, нановолокна, нанопленки, которые характеризуются размерами до 100 нм. Нанонаука не может во всех случаях опираться ни на классическую механику сплошных сред, ни на положения статистической термодинамики. Нановолокна и композиты на их основе привлекают к себе внимание, благодаря своим необычным механическим и электрофизическим свойствам, а также многообразию перспектив их практического применения. В настоящее время работы ограничиваются, в основном фундаментальными исследованиями. Это происходит, в частности, из-за сложности манипулирования объектами такого масштаба. Работа по получению и исследованию структуры и различных вариантов применения нановолокон является одной из наиболее актуальных задач современной науки.

Метод молекулярной динамики хорошо зарекомендовал себя при проверке выводов различных теорий. Данный метод позволяет рассчитать любые свойства системы, как термодинамические (например, энергию, давление, энтропию), так и кинетические (коэффициенты диффузии, частоты колебаний атомов), причем в данном методе имеется возможность соизмерять динамику исследуемых процессов с реальным временем. Главным недостатком метода, по сравнению с другими, являются большие затраты машинного времени, требуемые для выполнения расчетов. Возросшие в последнее время возможности вычислительной техники позволили использовать методы компьютерного моделирования для исследования механизмов миграции атомов и трансформации структуры при температурно-силовых воздействиях, требующих более продолжительных и относительно сложных компьютерных экспериментов.

Многие нановолокна и сплавы обладают уникальными свойствами. Если рассматривать свойства частиц материала, имеющих размеры порядка десятков и сотен нанометров, то в таких частицах по сравнению с большими объектами возрастает доля поверхностных атомов или молекул по сравнению с атомами (молекулами) в объеме. Это влияет на свойства частиц в целом. Электрические, магнитные, механические и некоторые другие свойства материала, состоящего из наночастиц, перестают быть постоянными и начинают зависеть от формы частиц, размеров, при различных температурах и наличии различных типов дефектов и несовершенств.

Известно, что структурно-энергетические превращения в процессе деформации имеют свою стадийность. Каждая стадия отличается типом образующихся дефектов и характером взаимодействия между ними.

Представленное исследование, с привлечением метода молекулярной динамики, структурно-энергетических превращений в нановолокнах чистых ГЦК металлов Ni и сплава Ni₃Fe, в зависимости от их конфигурации, формы и размеров, в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения при различных температурах является актуальным.

Новая концепция использования нановолокон как строительных блоков для логических и запоминающих схем делает абсолютно необходимым полное понимание механического поведения таких объектов.

Цель работы в изучении методами компьютерного моделирования структурной перестройки нановолокон, подвергнутых высокоскоростной деформации в зависимости от конфигурации, формы и размеров, концентрации вакансий при различных температурах. Для достижения указанной цели в работе ставились следующие задачи:

1- Построение математической модели, которая в едином подходе объединяет как механизмы деформационного поведения, так и механизмы разрушения дальнего атомного порядка в нановолокнах Ni и сплава Ni₃Fe.

2- Детальное рассмотрение и математическое описание влияния формы, размера, температуры и концентрации вакансий на механические свойства нановолокон Ni и сплава Ni₃Fe.

3- Сделана попытка оценить возможное влияние различных форм, размеров нановолокон, температуры, концентрации вакансий, на особенности структурно-энергетических превращений, протекающих в них во время одноосного растяжения.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что методом молекулярной динамики на атомном уровне исследованы основные стадии структурно-энергетических превращений, происходящих в нановолокнах Ni и Ni₃Fe различных форм, размеров и концентрации вакансий в процессе высокоскоростной деформации растяжения, при различных температурах. Моделирование проводилось с использованием как парных потенциалов межатомного взаимодействия типа Морза, так и потенциалов Клери –Розато, построенных на основе первопринципных положений.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что полученные результаты могут быть использованы для развития теории пластической деформации и при исследовании деформации нановолокон ГЦК металлов и сплавов, могут быть использованы для развития современных представлений о процессах протекающих на микро-уровне в твердых телах. Изучение механических свойств нановолокон металлов и сплавов полезно для проектирования, изготовления наноустройств. Настоящее исследование демонстрирует успех моделирования при изучении основных механизмов пластичности и разрушения неноблоков на атомном уровне. Результаты компьютерного моделирования могут быть использованы в качестве демонстрационного материала для студентов материаловедческих специальностей, на их базе возможно создание работ для лабораторного практикума.

На защиту выносятся следующие положения:

1. При исследовании особенностей процессов деформации и разрушения нановолокон допустимо применение для описания межатомных взаимодействий наряду с первопринципными (*ab initio*) потенциалами Клери –Розато, так и простых парных потенциалов типа Морза..
2. Оценить распределение четырех стадий деформации нановолокон: квазиупругой, пластической, течения, разрушения по интенсивности и протяженности в зависимости от концентрации вакансий, формы и размеров образцов.
3. Температура эксперимента влияет на характер структурно-энергетических превращений на всех этапах деформации. Температуры влияют на длительность всех стадии деформации, в частности на количество генерируемых точечных дефектов на первой стадии деформации и величину откольной прочности материала.
4. Точечных дефектов вакансий: вакансий эксперимента влияет на характер структурно-энергетических превращений на всех этапах деформации. Величина вакансий влияет на длительность первой стадии деформации, количество точечных дефектов на первой стадии деформации и величину откольной прочности материала.
5. Результаты моделирования могли быть полезны для того, чтобы избежать разрушения материалов, предсказывая (предугадывая) положение разрушения. С помощью моделирования молекулярной динамики было исследовано поведение нановолокнах Ni с различными концентрациями вакансий при растяжении.

Апробация работы. Результаты работы доложены на международных и российских конференциях и симпозиумах: всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и молодёжь – 2013» (АлтГТУ 25 - 30 апреля 2013), IV международной научно-практической Конференции (АлтГТУ 4- 5 апреля 2013), 5-ой Международной конференции "Проблемы и перспективы развития литейного, сварочного и кузнечно-штамповочного производств"(АлтГТУ с 18 - 19 декабря 2013), INTERNATIONAL CONFERENCE« Hierarchically built systems of organic and inorganic nature» (Tomsk Russia September 9-13, 2013), European Materials Research Society (E-MRS) FALL MEETING (Warsaw University of Technology, Warsaw, September 16-20, Poland, 2013) ,54 Международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (11–15 ноября 2013 года, Екатеринбург, Россия), 3rd International Conference on Mathematics & Information Science «ICMIS 2013» (Luxor, Egypt, 28-30 Dec. 2013), конференции «Наследственная

механика деформирования и разрушения твердых тел - научное наследие Ю.Н. Работнова»(Москва, 24-26 февраля 2014, Институт машиноведения механике - Российская академия наук).

Публикации. Результаты работы отражены в 14 публикациях в российских и зарубежных изданиях, семь из которых в журналах, включенных в список ВАК для публикации диссертационных работ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, основных результатов и заключения, полученных в настоящей работе и списка литературы. Объем диссертации составляет 147 страницы, из которых 70 рисунка и 18 таблицы. Список литературы содержит 176 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

Первая глава посвящена обзору современных теоретических и экспериментальных сведений о наноматериалах: описаны виды наноматериалов, их свойства и использование, представлены экспериментальные и теоретические способы исследования наноматериалов. Дан исторический обзор метода МД, приведены основные задачи, решаемые с помощью МД, которые решаются при исследовании свойств материалов. Перечислены потенциалы межатомного взаимодействия, применяемые в методе молекулярной динамики. В конце первой главы сформулированы основные задачи диссертационной работы.

Во второй главе содержится описание применяемых методик и моделей при исследовании нановолокон, Методы компьютерного моделирования, Изложены методики определения параметров для многочастичных потенциалов: Клери-Розато и парных потенциальных функций Морзе, применительно чистому Ni и интерметаллиду Ni₃Fe со сверхструктурой L1₂.

1- Парных потенциальных функций Морзе[3-7]:

Для расчета взаимодействия между атомами выбраны парные потенциальные функции Морза:

$$\varphi_{KL}(|r_i - r_j|) = D_{KL} \beta_{KL} \left(\beta_{KL} e^{-\alpha_{KL} |r_i - r_j|} - 2 \right) \quad (1)$$

где φ_{KL} - потенциал межатомного взаимодействия атомов сорта K и L , r_i и r_j – радиус-векторы атомов i и j , соответственно, D_{KL} , α_{KL} , β_{KL} – параметры

потенциала межатомного взаимодействия между атомами сорта К и L, которые были заимствованы из работы [3].

2- Многочастичных потенциалов, Клери-Розато:

Межатомные взаимодействия были рассчитаны с использованием потенциалов сильной связи предложенных Клери-Розато [4]. Потенциалы предложенные Клери-Розато [4] хорошо проявили себя в групповых исследованиях [5-7]. В МПА формально, связующая энергия атома i в кристалле с N количеством атомов является суммой взаимодействия парных потенциальных и внедрения потенциальных функций.

В нашей модели потенциальная энергия системы рассчитана из соотношения

$$U = \sum_i (E_b^i + E_r^i), \dots \dots \dots (2)$$

Где,

$$E_r^i = \sum_{j \neq i} U_{ij}(r_{ij}) = \sum_j A \cdot \exp[-p(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1)], \dots \dots \dots (3) \text{ я}$$

вляется парной частичной составляющей энергии, а

$$E_b^i = - \sqrt{\sum_{j \neq i} \phi(r_{ij})}, \dots \dots \dots (4)$$

$$\phi(r_{ij}) = \zeta^2 \cdot \exp[2q(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1)], \dots \dots \dots (5)$$

является многочастичным вкладом.

В уравнениях (3) - (5), r_0 - равновесное расстояние между атомами i -м и j -м; A , ζ , p , q - регулируемые параметры, определяющие взаимодействие между этими атомами.

При моделировании деформации в исследуемых нановолокнах производилось периодически повторяющееся поступательное смещение атомов, относительно абсолютно жестких захватов вдоль оси растяжения нановолокна в противоположных направлениях друг от друга. Структура абсолютно жестких захватов оставалась неизменной на протяжении всего эксперимента. Недеформируемые абсолютно жесткие захваты смещались на 0,001 нм через каждые 0,1 пс. Суммарная скорость движения захватов составляла 20 м/с и соответствовала скорости деформации от $2,29 \cdot 10^9$ до $3,39 \cdot 10^9$ с⁻¹ в зависимости от длины исследуемого нановолокна. Такой порядок скоростей встречается в работах по моделированию деформации растяжения/сжатия [8-12]. Температура в компьютерном эксперименте устанавливалась равной 10К, 300 К или близкой к температуре плавления соответствующего материала. В начале компьютерного эксперимента температура задавалась через скорости атомов, модули которых вычислялись по формуле (6):

$$|v_i| = \sqrt{\frac{2k_b T_0}{m_i}}, \quad (6)$$

где k_b – постоянная Больцмана, T_0 – заданная температура, m_i – масса атома i .

При деформации нановолокна производилось термостатирование с временем реакции термостата $t_r=0,1$ пс согласно алгоритма Берендсена [13]. Структурная перестройка атомов внутри расчетного блока кристалла была реализована методом молекулярной динамики через решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений движения Ньютона, описывающих движение частиц.

Моделирование смещения атомов на захватах было проведено с учетом отношения Пуассона для упругого тела. Изменение конфигурации захватов заключалась в том, что на стадии упругой деформации захваты сжимались в направлении, перпендикулярном оси растяжения (поперечном), с условием, чтобы общий объем захватов не изменялся (рис. 2.11). Согласно отношению Пуассона, в процессе высокоскоростной одноосной деформации растяжения нановолокон, происходило сжатие захватов на всей стадии упругой деформации с условием, чтобы общий объем нановолокна не изменялся. Общая скорость движения захватов составляла 20 м/с.

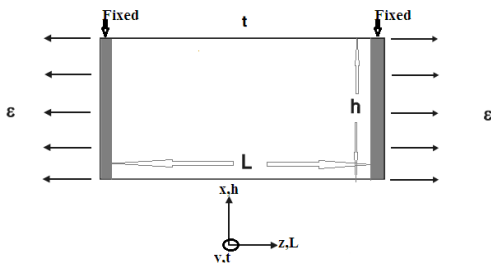


Рис. 1. Схема моделирования жестких захватов с учетом отношения Пуассона.

Приведены формулы расчета исследуемых параметров и физических величин, определяющих уравнения, в параметрах напряжение - деформация, Дано обоснование выбора применяемых в работе потенциалов межатомного взаимодействия. В конце второй главы дано описание визуализаторов, применяемых в работе.

В третьей главе содержится описание применяемых методик и моделей при исследовании нановолокон, Методы компьютерного моделирования, Изложены методики определения параметров для многочастичных потенциалов: Клер-Розато и парных потенциальных функций Морзе, применительно чистому Ni и интерметаллиду Ni₃Fe со сверхструктурой L12.

Приведены формулы расчета исследуемых параметров и физических величин, определяющих уравнения, в параметрах напряжение - деформация. Дано обоснование выбора применяемых в работе потенциалов межатомного взаимодействия. В конце второй главы дано описание визуализаторов, применяемых в работе. Характер деформации, скольжения, двойникования и образования шейки были изучены.

Анализ графиков на рис.2 показал, что средние значения длительности первой стадии деформации для наноблоков, длиной 24, 36, 72 и 96 составляют 40, 50, 90 и 120 Пс, соответственно. Длительность стадии пластической деформации равна 200, 250, 360, 150 Пс соответственно.

Значение запасенной энергии на пике графика деформации в конце первой стадии для приведенных наноблоков составляет 0,075, 0,085, 0,06 и 0,06 эВ/атом соответственно. Уровень запасенной энергии в конце стадии пластической деформации для исследуемых наноблоков равен 0,12, 0,085, 0,095 и 0,02 эВ/атом, соответственно.

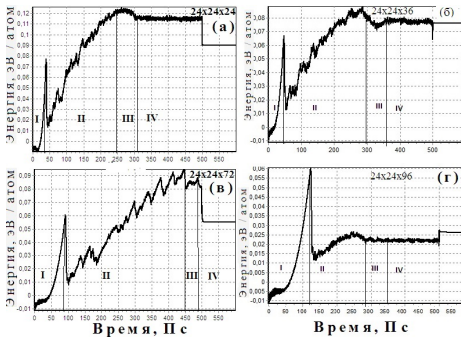


Рис. 2. Зависимость запасенной энергии деформации от времени эксперимента при температуре 300 К образцов длиной Ni 24(а), 36(б), 72(в), и 96(г)..

Рисунок 3 представляет отношение между напряжением и деформацией для наноблоков Ni, в четырех размерах: 24x 24 x 24, 24x 24 x 36 24x24x 72 и 24x 24 x 96.

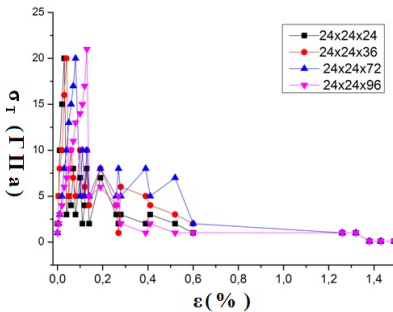


Рис. 3. Отношения между напряжением и деформацией для Ni при температуре 300К образцов длиной 24,36, 72 и 96.

На следующем этапе эксперимента одноосному растяжению подвергались образцы кубической формы с длиной стороны соответствующей атомным упаковкам 5,10, 20, 24, 30, 36, 40.

Результаты, приведенные в таблицах коррелируют с графиками изменения запасенной энергии деформации образцов во времени эксперимента (рис. 4).

Значение запасенной энергии на пике графика деформации в конце первой стадии для образцов с длиной сторон 5, 20, 30 и 40 наноблоков составляет 0,17, 0,08, 0,05 и 0,03 эВ/атом соответственно. Уровень запасенной энергии в конце стадии пластической деформации для исследуемых наноблоков составляет 0,6, 0,16, 0,13 и 0,1 эВ/атом, соответственно.

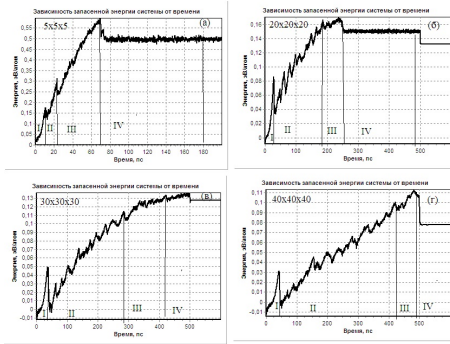


Рис. 4. Изменение запасенной энергии в зависимости от времени растяжения. Эксперимент при 300К для 5 x 5 x 5 (а) , 20x 20 x 20(б), 30x 30 x 30(в) и 40 x 40 x 40(г), наноблоков Ni.

Рис.5 демонстрирует зависимость предела текучести наноблока от длины, который уменьшается почти по линейному закону с ростом длины. Отклонения от линейности по-видимому могут быть уменьшены при увеличении числа атомов в исследуемых наноблоках.

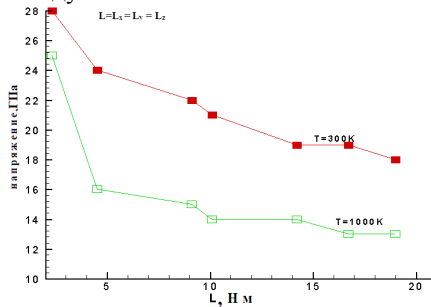


Рис. 5. Отношение между пределом текучести и длина для различных нановолокони Ni при различных температурах.

В зоне пластической деформации происходит структурная перестройка исследуемых образцов. Картина структурных изменений, происходящая в образце 40 x 40 x 40. показана на рис. 6. Сплошными линиями выделены зоны проскальзывания дислокаций с образованием на поверхности образца ступенек. Внутри блока формируются двойники. При дальнейшей деформации возрастает число возникающих дислокаций, в том числе и в других плоскостях скольжения.

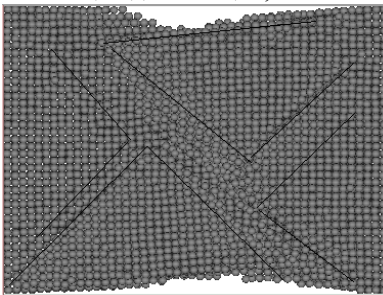


Рис. 6. Атомное распределение компонент для 40×40×40 нановолокон Ni. Деформации растяжения, скольжение, скольжения домена и двойникования в момент времени 100 пс в области пластической деформации.

Стадия пластической деформации переходит в следующую третью стадию – течение. На этой стадии образуется шейка. Если образец достаточно длинный может возникать несколько шеек. Может возникать эффект бегающей шейки.

Пример атомной структуры наноблока размера $40 \times 40 \times 40$ приведен на рисунке 7 (а, б) демонстрирует эволюцию во времени структуры образца на стадии течения, во времени.

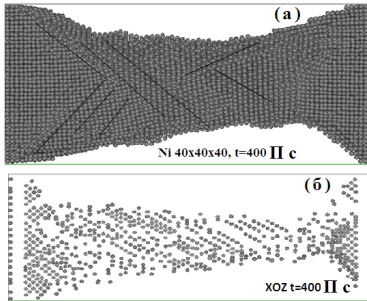


Рис. 7. Атомное распределение компонент для $40 \times 40 \times 40$ нановолокна Ni при деформации растяжения: скольжение, образование доменов и двойникование (а) в момент времени 400 пс, (б) атомная структура 5-ой плоскости $\langle 101 \rangle$ в момент времени 400 пс.

После завершения процесса разрыва частей наноблока в последних начинается восстановление кристаллической структуры. Полное восстановление до идеального состояния не достигается, даже отдельные атомные плоскости разделяются на подплоскости, как показано на рис .8. а. На рис.8. б. показано фотографический снимок 5-ой плоскости $\langle 101 \rangle$ в момент времени 600 пс.

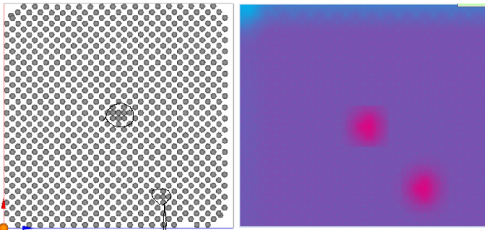


Рис. 8. Деформации нановолокна Ni сечения в 40 атомов в 5-ой плоскости $[101]$ в момент времени 600 пс.

При изменении сечений образцов происходит трансформация характеристик структурных перестроек в образцах, имеющая место во времени.

Анализ графиков на рис. 9 показал, что средние значения длительности первой стадии деформации для нанопленок, сечения 10×10 , 25×25 , 50×50 и 70×70 составляют 9, 16, 18 и 21 Пс, соответственно. Длительность стадии пластической деформации равна 41, 34, 37, 41 Пс соответственно.

Значение запасенной энергии на пике графика деформации в конце первой стадии для приведенных нанопленок составляет 0,32, 0,34, 0,45 и 0,55 эВ/атом соответственно. Уровень запасенной энергии в конце стадии пластической деформации для исследуемых нанопленок равен 0,5, 0,55, 0,68 и 0,74 эВ/атом, соответственно.

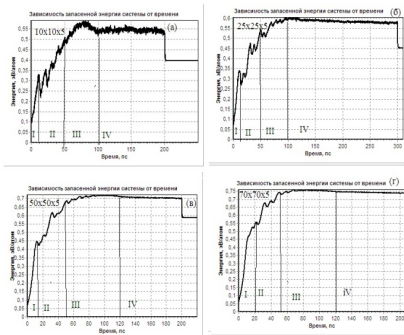


Рис.9. Изменение запасенной энергии в зависимости от времени растяжения. Эксперимент при 1000К для $10 \times 10 \times 5$ (а), $25 \times 25 \times 5$ (б), $50 \times 50 \times 5$ (в) и $70 \times 70 \times 5$ (г), нанопленок Ni.

Рисунок 10 представляет атомную картину, обнаруженную при разрушении нанопленок Ni с различными сечениями. Поверхностные атомы играют важную роль в механическом поведении наноструктур. Хотя отдельный случай разрушения не предсказуем, много случаев разрушения демонстрируют статистику. В большинстве случаев, при относительно малых размерах наноблоков, точное положение разрушения встречается в центральной части, по мере того, как длина наноблока увеличивается, положение разрыва постепенно сдвигается к концам.

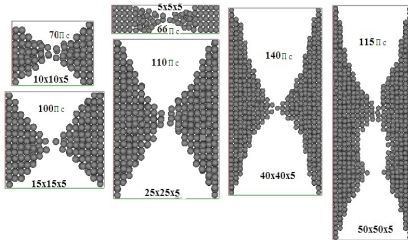


Рис. 10. Атомная структура нанопленок Ni различного сечения на момент разрушения кристалла при $T = 300\text{K}$.

На рис.11. показано изменение запасенной энергии деформации кристалла в зависимости от времени растяжения при 300 К и 1000 К для $10 \times 10 \times 10$ нановолокон Ni без вакансий и при концентрации вакансий равной 2,22%. Как упоминалось ранее, время растяжения определяет уровень деформирующего напряжения.

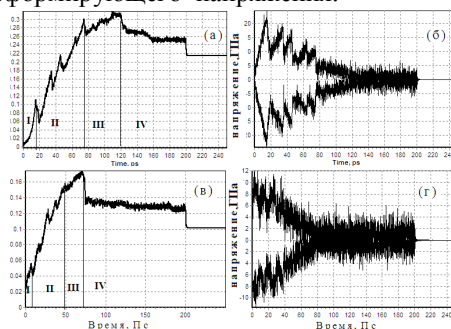


Рис. 11. Зависимость запасенной энергии деформации от времени эксперимента при температурах 300 К (а) никель- $10 \times 10 \times 10$ и $V=0.0\%$, и (в) никель- $10 \times 10 \times 10$ и $V=2.2\%$, и напряжения на захватах от времени при температурах 300 К (б) никель- $10 \times 10 \times 10$ и $V=0.0\%$, и (г) никель- $10 \times 10 \times 10$ и $V=2.2\%$.

Деформация нановолокна происходит в быстрой стадии процесса разрушения атомов. Результаты показали, что положение разрушения зависит от

количества концентрации вакансий рис 12. На рис 8 представлено расчетное положение разрушения для нановолокон Ni при различных концентрации вакансий.

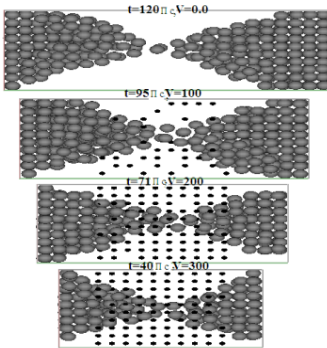


Рис .12. Снимки 10х10х10 нановолокони Ni с различных концентрации вакансий на момента разрушения кристалла при T = 300K.

В четвертой главе посвящена исследованию структурно-энергетических превращений, имеющих место в процессе деформации нановолокон интерметаллида Ni_3Fe со сверхструктурой L1_2 . Для трехмерного моделирования по методу молекулярной динамики процессов деформации и разрушения нанообразцов сплава Ni_3Fe , межатомные взаимодействия были представлены для различных пар атомов в форме парных потенциалов Морзе, характеристики которых были приведены во второй главе. Расчетный блок кристалла полностью упорядоченного кристалла на основе ГЦК решетки с упаковкой компонент с основанием в виде квадрата в плоскости $\{001\}$, с высотой соответствующей направлению $\langle 001 \rangle$. К расчетному блоку кристалла прикладывались свободные граничные условия в направлениях $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ и жесткие в направлении $\langle 001 \rangle$.

В областях упругой деформации, при относительно небольших напряжениях сохраняется атомный дальний порядок, соответствующий сверхструктуре L1_2 (рис 13) . С увеличением растягивающего напряжения возникают точечные дефекты в виде пар Френкеля; при перемешивании концентрации вакансий и межузельных атомов происходит нарушение ближнего порядка как относительно базовой кристаллической структуры, так и сверхструктуры.

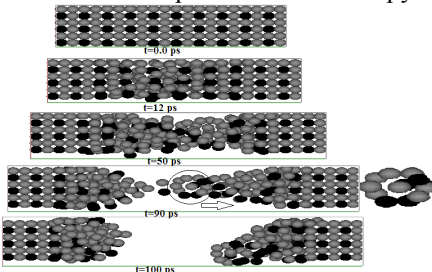


Рис 13.Изменение структуры сплава Ni_3Fe 6 x 6 x 12 во времени при его растяжении вдоль направления $\langle 100 \rangle$, начиная с совершенного кристалла ГЦК решетки при 300 K.

Анализ графиков на рис. 14. показал, что средние значения длительности первой стадии деформации для наноблоков, длиной 6, 12, 24 и 40

составляют 15, 20, 35 и 40 Пс, соответственно. Длительность стадии пластической деформации равна 40, 50, 35, 20 Пс соответственно. Значение запасенной энергии на пике графика деформации в конце первой стадии для приведенных наноблоков составляет 0,15, 0,1, 0,08 и 0,06 эВ/атом соответственно. Уровень запасенной энергии в конце стадии пластической деформации для исследуемых наноблоков равен 0,35, 0,28, 0,12 и 0,085 эВ/атом, соответственно.

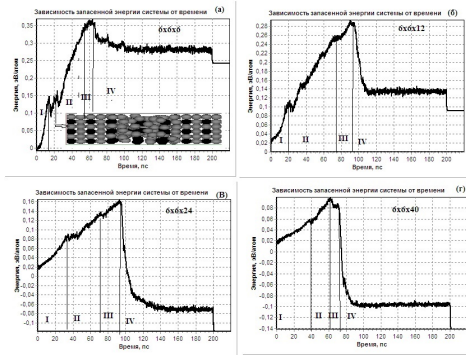


Рис.14. Зависимость запасенной энергии деформации от времени эксперимента при температура 300 К сплава Ni_3Fe -6 x 6 x 6 (а), 6x6x24 (б), 6x6x24(в) и 6x6x40(г).

Рисунок 15 показывает отношения предел текучести к длине, полученные для температуры 300 К. Рисунок 16 представляет атомную картину, обнаруженную при разрушении сплавов Ni_3Fe различной длины.

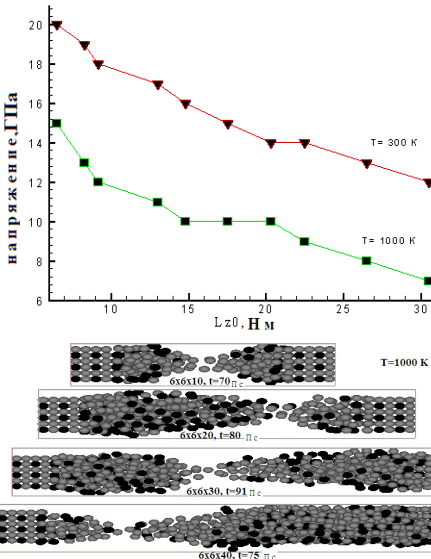


Рис.15. Отношения предела текучести к длине для различных по длине нановолокон сплава Ni_3Fe при различных температурах.

Рис.16. Атомная структура нановолокон сплава Ni_3Fe различной длины на момент разрушения кристалла.

В компьютерных экспериментах с образцами нановолокон, у которых длина была больше чем в два раза сечения, наблюдались следующие особенности. Величина предела текучести зависела от размеров поперечного сечения образца. Длина модельного блока влияла на место зарождения очага деформации и длительность первой упругой стадии деформации. В случае, например, когда длина нановолокна в шесть раз больше диаметра

поперечного сечения (рис. 17), наблюдается зарождение шести и более очагов деформации (указаны окружностями на рис. 17). Время развития стадии упругой деформации увеличивалось в шесть раз.

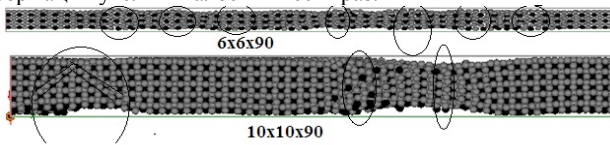


Рис.17. Атомная структура нановолокон Ni_3Fe различных сечений на момент время 100 Пс при 300К.

Рисунок .18, показывает отношения между пределом текучести и температурой, полученные при моделировании нановолокон Ni_3Fe 6 x 6 x 12 и перечисленные в таблице 5.3. Предел текучести уменьшается с ростом температуры почти по линейному закону. На рисунке приведена зависимость предела текучести от температуры для образца вдвое большей длины. Зависимость между исследуемыми параметрами оказывается аналогичной.

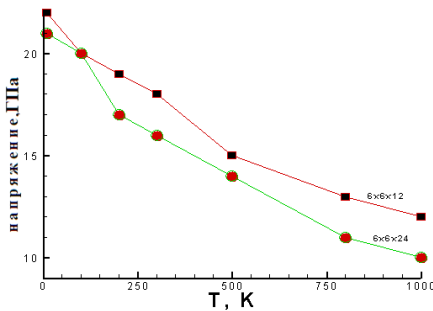


Рис. 18. Отношения предела текучести к температуре для различных по длине нановолокон сплава Ni_3Fe .

Рисунки 19 представляет атомную картину, обнаруженную при разрушении образцов длиной в 24 атомных ряда при различных температурах. С увеличением температура образца разрушение наступает при более высоких деформациях. Положение разрушения зависит от температуры сплавов. Поверхностные атомы играют важную роль в механическом поведении наноструктур. Хотя отдельный случай разрушения не предсказуем, конечное положение разрушения встречается в основном в центральной части.

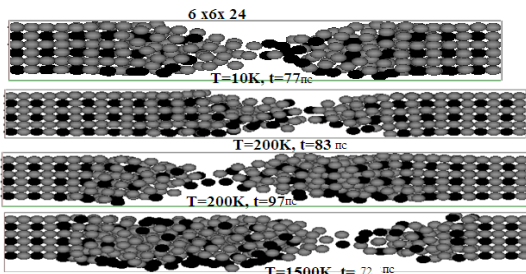


Рис. 19. Атомная структура нановолокон сплава Ni_3Fe -6 x 6 x 24 при различных температурах на момент разрушения кристалла.

Пятая глава посвящена исследованию структурно-энергетических превращений, имеющих место в процессе деформации нановолокон ГЦК интерметаллида Ni . Методом молекулярной динамики исследуются атомные

механизмы структурной перестройки монокристалла Ni происходящие при приложении одноосного растягивающего напряжения со скоростью 20 м/с. Инициализируется блок в форме прямоугольного параллелепипеда с основанием в виде квадрата в плоскости $\{001\}$, высота которого соответствует направлению $\langle 001 \rangle$. К расчетному блоку кристалла прикладываются свободные граничные условия в направлениях $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ и жесткие в направлении $\langle 001 \rangle$. Компьютерное моделирование выполнено с использованием многочастичного межатомного потенциала Клери-Розато потенциала для Ni в приближении второго момента из ТБ модели. Выявлены механизмы, реализующие структурно-энергетические превращения на каждой стадии деформации. Дан сравнительный анализ структурно-энергетических превращений, происходящих при одноосном растяжении нановолокон Ni. МД моделирование используется для изучения влияния различных форм, размеров, температуры, концентрации вакансий, для нановолокон Ni на природе деформации и разрушения.

На любом этапе деформации предполагалась возможность последующего охлаждения расчетного блока с целью детального анализа структурных изменений произошедших в нем. Размер расчетного блока кристалла составлял от 163 атомов, что соответствовало упаковке 5 атомов вдоль грани в основании прямоугольного параллелепипеда и 5 по его высоте, до 72500 что соответствовало упаковке 50 атомов вдоль грани в основании прямоугольного параллелепипеда и 50 по его высоте.

На рис.20. показано изменение запасенной энергии деформации кристалла в зависимости о времени растяжения при 300К для (а) 10 x 10 x 10 и (б) 50x 50 x 50 наноблоков Ni.

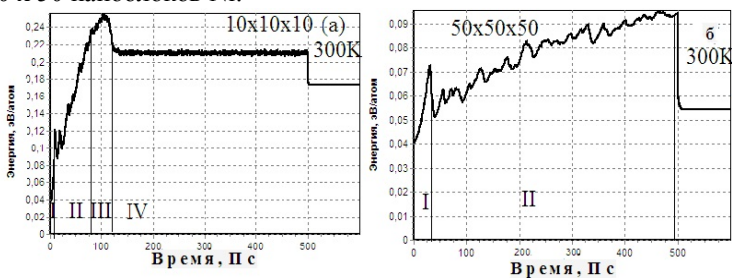


Рис.20. Изменение запасенной энергии в зависимости от времени растяжения, эксперимента при 300К для (а) 10 x 10 x 10 и (б) 50x 50 x 50 нановолокони Ni.

Во время квазиупругой деформации значение напряжения на захватах росло линейно, так как скорость деформации была постоянной. Угол наклона прямой графика «напряжение-время деформации» определялся материалом нановолокна и направлением растяжения.

В зоне пластической деформации происходит структурная перестройка исследуемых образцов. Картина структурных изменений, происходящая в образце 40 x 40 x 40 показана на рис. 21. Сплошными линиями выделены зоны проскальзывания дислокаций с образованием на поверхности образца ступенек .

Внутри блока формируются двойники. При дальнейшей деформации возрастает число возникающих дислокаций, в том числе и в других плоскостях скольжения

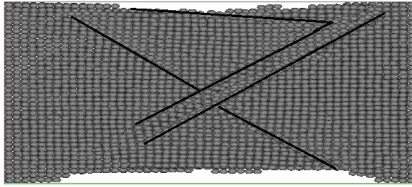


Рис.21. Атомная структура 40 x 40 x 40 наноблока Ni в момент времени 100 пс, в области пластической деформации.

Рисунок 22 представляет атомную картину, обнаруженную при разрушении наноблоков Ni различных размеров. Как следует из рисунка и результатов, приведенных в таблица 1 с увеличением размера образца разрушение наступает при более высоких деформациях. Положение разрушения зависит от размеров наноблоков. По видимому для малых образцов оказывается важным влияние поверхностных атомов, их доля уменьшается с ростом размера образца.

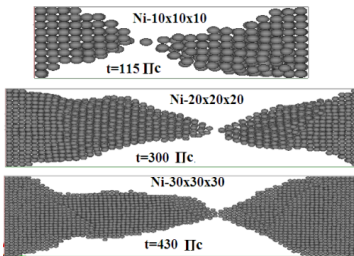


Рис .22. Атомная структура наноблоков Ni различных размеров на момент разрушения кристалла.

Рисунок 23 показывает отношения предела текучести к длине деформируемых образцов на этой стадии, полученные при температуре 300 K, как представлено в таблице 1. Как видно из рисунка, напряжение уменьшается с увеличением размера. При повышении температуры эксперимента до 1000 K. результаты отношения напряжения к длине демонстрируют значительное колебание относительно линейной зависимости (рис.23.), однако, величины колебаний могут уменьшены при увеличении числа атомов исследуемых наноблоков.

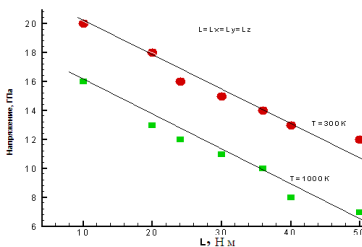


Рис.23. Отношения между предел текучести - длины для различных наноблоков Ni при 300K и 1000K.

Более подробно компьютерный эксперимент выполнялся в интервале температур от 100 К до 1500 К. Исследование проводилось на примере образца 30 x 30 x 30. На рис. 24. показано изменение запасенной энергии деформации кристалла в зависимости о времени растяжения для при температурах 100 К, 500К, 1000К и 1100 К для 30x 30 x 30 наноблока Ni.

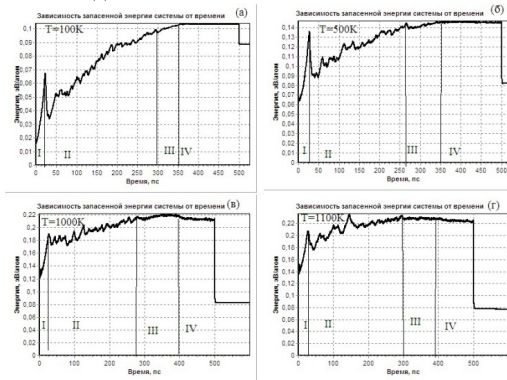


Рис. 24. Изменение запасенной энергии в зависимости от времени растяжения для 30 x 30 x 30 наноблока Ni при 100 К(а), при 500 К(б), при 1000 К (в) и при 1100 К (г).

Рис.25. демонстрирует зависимость предела текучести наноблока от температуры, который уменьшается почти по линейному закону с ростом температуры. Считается, что понижение предела текучести является результатом ослабления связей между атомами Ni, вызванного повышением температуры.

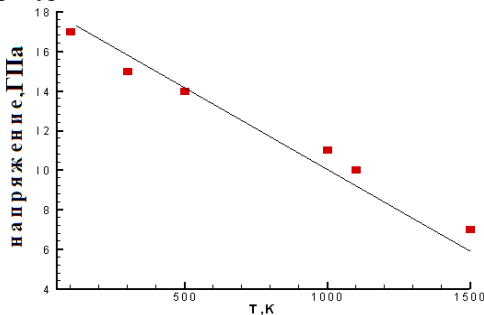


Рис. 25. Отношения между пределом текучести и температуры для 30 x 30 x 30 наноблока Ni.

Таким образом, на первой стадии деформации в нановолокнах Ni при всех температурах накапливались точечные дефекты в виде междоузлий и вакансий. Количество точечных дефектов увеличивалось с ростом температуры эксперимента. В конце первой стадии в результате проскальзывания дислокационных петель вдоль частей нановолокна образовывались субструктурные блоки с дефектами упаковки на границах между блоками. С ростом деформации на границах имеющихся субструктурных блоков образовывались новые субструктурные блоки путем поворота участков нановолокна.

В настоящем разделе выполнено исследование влияния концентрации вакансий на деформацию одноосного растяжения нанообразца на примере блока размером 30 x 30 x 30. На Рисунках 26. показано изменение запасенной

энергии деформации кристалла в зависимости от времени растяжения при 300 К для различных концентраций вакансий. Эксперименты показали, что когда увеличивается число вакансии, первая стадия деформации сужается, и также сужается вторая стадия (Рисунки 26).

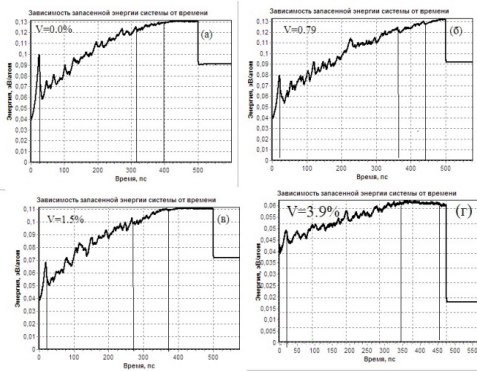


Рис. 26. Изменение запасенной энергии в зависимости от времени растяжения, эксперимент при 300К для 30 x 30 x 30 наноблока Ni при $V = 0.0\%$ (а), при $V = 0.79\%$ (б), при $V = 1.5\%$ (в), и при $V = 3.9\%$ (г).

Рисунок 27 (а, б) показывает изменение отношения напряжения к деформации одноосного растяжения наноблока при различных концентрациях вакансий при температурах 300К и 1000К. Как видно из рисунка, отношения напряжений к деформациям уменьшаются с ростом температуры с увеличением числа вакансий. Осцилляции на графиках связаны со стадиями деформации механизмами реализующими ее.

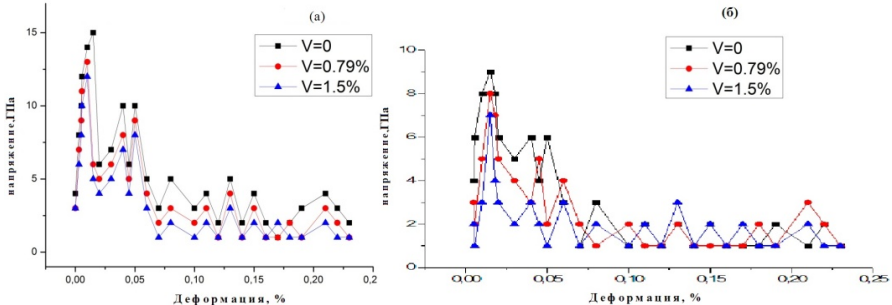


Рис 27. Отношения между напряжением и деформацией для 30 x 30 x 30 наноблока Ni- для разных концентратий вакансий при 300К(а) и при 1000К(б).

На рис.28 приводится зависимость изменения предела текучести от концентрации вакансий для 30 x 30 x 30 наноблока Ni при 300К и 1000 К. Предел текучести уменьшается с ростом числа вакансий почти по линейному закону. С ростом температуры уменьшается тангенс угла наклона. По-видимому, с тангенсом угла наклона может быть связан определенный активационный процесс.

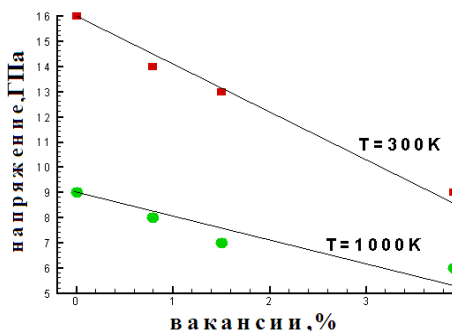


Рис. 28. Изменение предела текучести в зависимости от концентрации вакансий для $30 \times 30 \times 30$ наноблока Ni при 300 К и 1000 К.

В настоящем эксперименте одноосному растяжению подвергались образцы кубической формы с использованием потенциала Клери - Розато и потенциала Морза, с длиной стороны соответствующей атомным упаковкам 5, 10, 20, 24, 30, 36, 40.

Значение запасенной энергии на пике графика деформации в конце первой стадии $30 \times 30 \times 30$ наноблоков Ni при 300 К с использованием Морза потенциала и Клери - Розато потенциала составляет 0,05 и 0,1 эВ/атом соответственно. Уровень запасенной энергии в конце стадии пластической деформации для исследуемых потенциалов составляет 0,13 и 0,12 эВ/атом, соответственно (Рис.29).

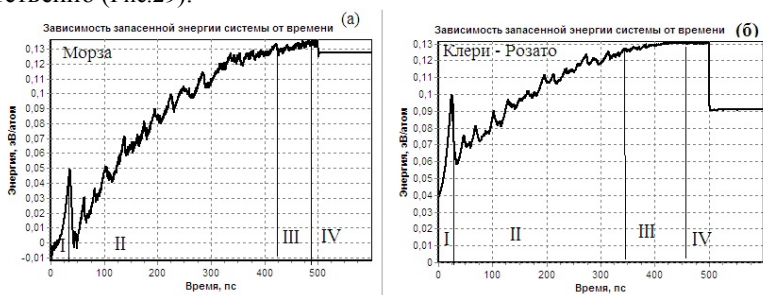


Рис.29 Изменение запасенной энергии в зависимости от времени растяжения для $30 \times 30 \times 30$ наноблоков Ni при 300 К с использованием Морза потенциала и Клери - Розато потенциала.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1- В результате исследований структурно-энергетических превращений в процессе деформации растяжения нановолокон ГЦК в нановолокнах Ni и Ni₃Fe различных форм, размеров, конфигураций и объема в процессе высокоскоростной одноосной деформации растяжения, при различных температурах, выявлены особенности развития четырех стадий структурно-энергетических превращений: квазиупругая, пластическая, течение и разрушение.

2- С увеличением объема образцов время завершения первой стадии деформации – квазиупругой возрастает, при этом величина предела текучести уменьшается, а время достижения разрушения образцов возрастает. С ростом температуры значения данных характеристик уменьшаются.

3- При изменении длины образцов происходит трансформация характеристик структурных перестроек в образцах, имеющая место во времени. Длина нановолокна влияет на величину временного интервала начала упругой деформации и длительности стадии пластической деформации. При увеличении размеров поперечного сечения, без увеличения длины образца, происходит увеличение предела текучести и длительности стадии квазиупругой деформации кратно увеличению сечения нановолокна.

4- Так как деформировались волокна малого поперечного сечения и с относительно большой скоростью в процессе нагружения на первых стадиях не обнаруживалось нарушения сверхструктурного порядка, то есть не возникали частичные дислокации. При увеличении размеров поперечного сечения, без увеличения длины образца, происходит увеличение предела текучести кратно увеличению сечения нановолокна.

5- Температура эксперимента влияет на характер структурно-энергетических превращений на всех этапах деформации. С увеличением температуры уменьшалась длительность первой стадии деформации и величина откольной прочности. С повышением температуры в конце первой стадии наблюдалось появление элементов аморфизации структуры. Стадия пластической деформации завершалась течением с образованием шейки.

6- Показано, при исследовании нановолокон Ni_1 , с изменением концентрации вакансий меняются значения всех физических параметров деформации. Предел текучести, время завершения первой стадии деформации (величина деформации), время начала разрушения образца (предельная длина неразорванного образца) уменьшаются с ростом числа вакансий в образце. Так, при различных температурах с увеличением концентрации вакансии наблюдается снижение напряжения на захватах.

7- Путем сравнения экспериментальных данных, воспроизводимых с использованием простых парных потенциалов Морза с данными, полученными из (*ab initio*) расчетов, с использованием методик и реализации потенциала Клери - Розато, было определено, что потенциалы Клери - Розато и Морза наиболее подходят для исследования характера структурно-энергетических превращений, имеющих место в деформируемых нановолокнах.

8- При относительно малых длинах образцов, нановолокон Ni и сплава Ni_3Fe , разрушение последних в процессе одноосного растяжения происходит только в одном месте. При увеличении длины волокна в случае металла до значения превышения длины по отношению к поперечному сечению порядка 5 – 6 раз наблюдается зарождение двух очагов образования разрушения вблизи каждого из захватов; для наноблоков сплава Ni_3Fe такая ситуация реализуется при длине нановолокон в восемь и более раз больше диаметра поперечного сечения.

Литература

1. Мышляев М.М., Шпейсман В.В., Камалов М.М. Стадийность деформации микрокристаллического алюминий-литиевого сплава в условиях сверхпластичности // ФТТ. - 2001. - Т. 43, № 11. - С. 2015-2020.
2. Панин А.В., Сон А.А., Иванов Ю.Ф., Копылов В.И. Особенности локализации и стадийности пластической деформации субмикрокристаллического армо-железа с полосовой фрагментированной субструктурой // Физическая мезомеханика. - 2004. - Т. 7, № 3. - С. 13-16.
3. Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B и $A_3B(C)$. Диссертация на соискание ученой степени к. ф.-м. н. - Томск, 1987. - 214 с.
4. F. Cleri and V. Rosato, Phys. Rev. B 48, 22 (1993).
5. E. F. Rexer, J. Jellinek, E. B. Krissinel, and E. K. Parks, J. Chem. Phys. 117, 82 (2002).
6. S. Darby, T. V. Mortimer-Jones, R. L. Johnston, and C. Roberts, J. Chem. Phys. 116, 1536 (2002).
7. K. Michaelian, M. R. Beltran, and I. L. Garzon, Phys. Rev. B 65, 041403(R) (2002).
8. Liang W., Zhou M. Size and strain rate effects in tensile deformation of Cu nanowires // Nanotech. - 2003. - V. 2. - P. 452-455.
9. Ji C., Park H.S. Geometric effects on the inelastic deformation of metal nanowires // Appl. Phys. Lett. - 2006. - V. 89. - P. 181916.
10. Park H.S., Laohom V. Surface composition effects on martensitic phase transformation in nickel aluminum nanowires // Philosophical Magazine. - 2007. - V. 87. - P. 2159-2168.
11. Koh S.J.A., Lee H.P. Molecular dynamics simulation of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires // Nanotechnology. - 2006. - V. 17. - P. 3451-3467.
12. Зольников К.П. Нелинейный отклик материалов на макромасштабном уровне при высокоэнергетических воздействиях. Автореферат диссертации на соискание ученой степени д. ф.-м. н. - Томск, 2002. - 35 с.
13. Berendsen H.J.C., et al. Molecular-dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys. - 1984. - V. 81, № 8, P. 3684-3690.

Публикации по теме диссертации:

Статьи, опубликованные в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ:

1. **M.M. Aish**, M.D. Starostenkov, Effect of volume on the mechanical properties of nickel nanowire// Materials Physics and Mechanics, vol. 18, no. 1, pp. 53–62, 2013.
2. Старостенков М.Д., **Айш М.М.**, Ситников А.А., Деформация различных никелевых нанопроводов при 300 К// ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ. – 2013, том 10, №3- С. 403-408. УДК 539.2.669.24.
3. M.D. Starostenkov, **M.M. Aish**, A.A. Sitnikov, S. A. Kotrechko, Deformation of different nickel nanowires at 300 K // Письма о материалах т.3 (2013) 180-183.
4. M.M. Aish, MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF 12X12X36 NICKEL NANOWIRE AT DIFFERENT TEMPERATURES // IJSIT, 2014, 3(1), 080-084.
5. M.M. Aish, M.D. Starostenkov, Molecular Dynamic Simulations of ultrathin Nickel nanowires at various temperatures // SOP Transactions on Nano-technology, in press.

International conferences:

6. **M.M. Aish**, M. D. Starostenkov, Study the stress - strain behavior of different Nickel nanowires at the same temperature // INTERNATIONAL CONFERENCE, Hierarchically built systems of organic and inorganic nature, Tomsk Russia September 9-13, 2013.
7. M. D. Starostenkov, **M.M. Aish**, A. V. Yashin, Molecular Dynamic Simulations of Nickel nanowires at different temperatures // E-MRS 2013 FALL MEETING September 16-20, Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland
8. **M.M. Aish**, M. D. Starostenkov, Study of stress- strain behavior of different Nickel nanowires at 300k // E-MRS 2013 FALL MEETING September 16-20, Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland.
9. Starostenkov M.D., **Aish M.M.** Molecular Dynamic Simulations of ultrathin Nickel nanowires at different temperatures// 54 Международная конференция «Актуальные проблемы прочности» 11–15 ноября 2013 года, Екатеринбург, Россия.
10. **Aish M.M.**, Starostenkov M. D. Molecular dynamic study for ultrathin Ni3Fe alloy // 54 Международная конференция «Актуальные проблемы прочности» 11–15 ноября 2013 года, Екатеринбург, Россия.
11. M. D. Starostenkov, **M.M. Aish**, Molecular dynamic study for ultrathin Nickel nanowires at the same temperature // 3rd International Conference on Mathematics & Information Science (ICMIS 2013), Luxor, Egypt, 28-30 Dec. 2013.
12. **M.M. Aish**, M. D. Starostenkov, Молекулярно-динамического моделирования Для Нановолокон никеля при различных температурах //«Наследственная механика деформирования и разрушения твердых тел - научное наследие Ю.Н.Работнова», Москва, 24-26 февраля 2014, Институт машиноведения механике -Российская академия наук.

Прочие статьи:

13. М. Д. Старостенков, **М.М. Айш**, Влияние вакансии деформацию механические напряжения структурные ультратонких никелевых нановолокон // ПОЛЗУНОВСКИЙ АЛЬМАНАХ, №2/2013- С. 133-136.
14. Мохамед Махмуд Айш, Deformation of 12 x 12 x 36 Nickel nanowire at different temperatures // Конференция «Наука и молодёжь – 2013» АлтГТУ 25 по 30 апреля 2013.
15. **Мохамед Махмуд Айш**, ИЗУЧЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ МОРЗЕ ДЛЯ 11 МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ// IV международная научно-практическая Конференция, АлтГТУ 4 по 5 апреля 2013.
16. M. D. Starostenkov, **M.M. Aish**, Влияние вакансии деформацию механические напряжения структурные ультратонких никелевых нановолокон //5-я Международная конференция "Проблемы и перспективы развития литейного, сварочного и кузнечно-штамповочного производств", АлтГТУ с 18 по 19 декабря 2013.