

УДК 539.3

## ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЯ В НАНОСТРУКТУРАХ В ПРОЦЕССЕ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

И. Ф. Головнев, Е. И. Головнева, М. С. Воронин<sup>\*,\*\*</sup>, Э. Р. Прууэл\*

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,  
630090 Новосибирск, Россия

\* Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

\*\* Новосибирский государственный технический университет, 630087 Новосибирск, Россия  
E-mails: golovnev@itam.nsc.ru, elena@itam.nsc.ru, mihause@academ.org, pruu@hydro.nsc.ru

Проведено исследование релаксации напряжения в наноразмерном стержне, содержащем структурные дефекты, в процессе одноосной деформации с постоянной скоростью и определены причины возникновения этого явления. В предположении, что структурные дефекты могут являться носителем необратимой деформации более высокого уровня по сравнению с дислокациями, поставленная задача решена с использованием метода молекулярной динамики. Установлено, что релаксация напряжения сопровождается переходом всей системы в стационарное состояние с более глубоким потенциальным минимумом по сравнению с энергией системы до процесса релаксации напряжения, вследствие чего происходит увеличение температуры и уменьшение компонент тензора деформации.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, релаксация напряжения, наноразмерный стержень, дефекты кристаллической решетки, носитель необратимой деформации.

DOI: 10.15372/PMTF20190412

**Введение.** Исследование кинетики необратимого деформирования вязкоупругих материалов является актуальной задачей [1]. Несмотря на различия в математическом описании этого явления с макроскопической точки зрения, основными идеями, использованными в известных моделях [2–4], являются ограниченность скорости движения и увеличение количества носителей необратимой деформации. Внешняя нагрузка, приложенная к среде, приводит в движение эти носители и вызывает их перераспределение в пространстве, что в свою очередь приводит к уменьшению величины внутренних напряжений, возникающих в результате действия внешней нагрузки. Такое уменьшение (релаксация) напряжений вследствие ограниченности скорости движения носителей происходит за некоторое конечное время — время релаксации напряжений.

Носители необратимой деформации различаются в зависимости от материала среды: в металлах — дислокации, в полимерах — структурные элементы различного масштаба (сегменты макромолекулярной цепи, ее звенья и группы атомов, составляющие звено).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-01-00468).

© Головнев И. Ф., Головнева Е. И., Воронин М. С., Прууэл Э. Р., 2019

Характер их движения, или механизм релаксации, также зависит от внешних условий: температуры и скорости деформации. Процессы релаксации, происходящие при высоких температурах или низких скоростях деформации, отсутствуют при больших скоростях или низких температурах. Это приводит, в частности, к возникновению нелинейной логарифмической зависимости напряжения от скорости деформации.

В формулировках многих моделей, применяемых для описания макроскопического поведения материала при деформировании, используются величины, определяемые кинетикой носителей необратимой деформации, т. е. движением микрообъектов. Эти величины, например время ожидания дислокацией термофлуктуации для преодоления потенциального барьера или энергия активации перехода структурной единицы, как правило, характеризуют переход микрообъекта из одного состояния в другое. Значения этих величин обычно вычисляются косвенно по результатам соответствующих экспериментов, например по зависимости напряжения течения от скорости деформации [5–7].

В настоящее время возможен расчет параметров кинетики дислокаций методами молекулярной динамики (МД) [8], что позволяет развивать так называемый многомасштабный подход [9]. Суть этого подхода заключается в расчете параметров микрокинетики методами МД и использовании их при решении какой-либо макроскопической задачи методами механики сплошных сред.

Отметим несколько направлений исследований, посвященных молекулярно-динамическому моделированию релаксации напряжений. В ряде работ изучается релаксация напряжений на границах зерен [10] и на границах раздела пленок в процессе их осаждения [11]. В этих работах показано, что движение дислокации способствует релаксации напряжения. Среди работ по данной тематике следует выделить работу [12], в которой исследуются механические свойства металлических (серебряных) нанопроволок при их растяжении с постоянной скоростью деформации (до 2 %). Авторы [12] делают вывод, что при наличии вакансий энергетический барьер, препятствующий зарождению дислокаций, уменьшается, способствуя релаксации напряжений. Однако в [12] моделирование процесса релаксации в нанопроволоке бесконечной длины с использованием периодических граничных условий и подхода Нозе — Гувера существенно отличается от моделирования релаксации напряжения в наностержнях конечной длины.

В данной работе с использованием метода МД проведено моделирование одноосного деформирования медного наностержня в предположении, что он может быть носителем необратимой деформации более высокого уровня по сравнению с дислокациями. Поведение наностержня под действием внешней нагрузки соответствует элементарному акту релаксации. Вследствие движения дислокаций в наностержне релаксирует макросистема в целом, состоящая из бесконечно большого числа таких наностержней.

**1. Физическая модель.** Процесс релаксации напряжения исследовался на примере одноосного растяжения металлического стержня с постоянной скоростью деформации. Сначала при достаточно высокой температуре формировался наностержень с дефектами. Затем он приводился в состояние, когда одна из границ двигалась с постоянной скоростью. После выхода на стационарный процесс при заданном значении полной деформации скорости зажимов полагались равными нулю, а координаты атомов, моделирующих зажимы, фиксировались в пространстве. После этого исследовались процессы, происходящие в наностержне.

**2. Моделирование начального состояния.** Формирование наностержня с заданными свойствами проводилось следующим образом.

Формировался медный кластер с идеальной гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой, имеющий форму прямоугольного параллелепипеда, который состоит из  $50 \times 5 \times 5$  кристаллических ячеек, расположенных вдоль осей координат  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  соответственно.

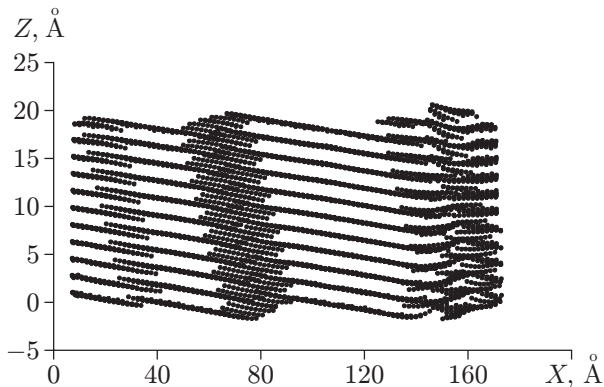


Рис. 1

Рис. 1. Наноструктура с дефектами после охлаждения

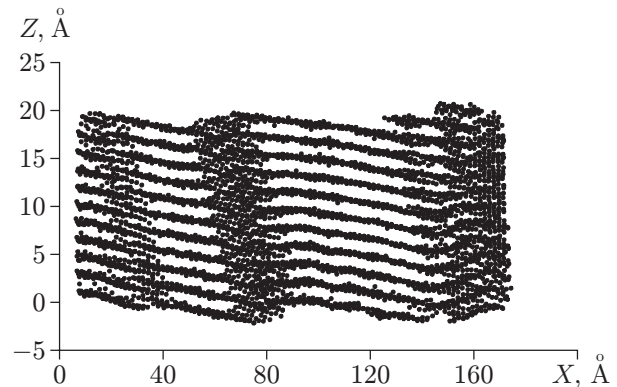


Рис. 2

Рис. 2. Наноструктура с дефектами после нагрева до температуры  $T = 500$  К

Для упрощения анализа получаемых результатов выбрана ориентация кристалла  $(1, 0, 0)$  в направлении оси  $X$ . Для описания межатомного взаимодействия использован потенциал, построенный на основе метода внедренного атома [13].

Для формирования наностержня с заданными свойствами, т. е. для формирования точечных дефектов в кристаллической структуре, из объема наноразмерного кластера с помощью датчика случайных чисел было удалено 5 % начального количества атомов. Атомы в объеме можно называть также объемными атомами. Их координационное число для ГЦК-структуры равно 12.

Затем с помощью метода искусственной вязкости [14] определялись координаты и импульсы системы в состоянии, в котором потенциальная энергия имеет глобальный минимум (“охлаждение” системы). После охлаждения в течение 100 пс система находится в состоянии, в котором потенциальная энергия минимальна при криогенной температуре (0,017 К).

В данной работе использовалась известная скоростная модификация метода Верле второго порядка точности с шагом по времени  $10^{-16}$  с. В случае изолированной системы на интервале времени, составляющем 50 пс, погрешность определения энергии не превышала  $10^{-5}$  % значения энергии в начальный момент времени.

Эволюцию наноструктуры предпочтительно изучать, исследуя изменение строения кристаллической решетки. Структура кристаллической решетки после охлаждения показана на рис. 1. Хорошо видны многочисленные дефекты в виде дислокаций, представляющих собой сдвиг четко выраженных атомных плоскостей.

После нагрева до температуры  $T = 500$  К (рис. 2) наблюдаются те же дефекты, но атомные плоскости размыты вследствие увеличения дисперсии атомов в них.

**3. Моделирование процесса одноосного растяжения с постоянной скоростью деформации.** После завершения построения структуры с дефектами при повышенной температуре моделировался процесс одноосного растяжения с постоянной скоростью деформации. Выбиралась следующая структура: левый край кристалла удерживался зажимом в фиксированном положении, правый край под действием движущегося правого зажима двигался с постоянной скоростью.

Крайний левый неподвижный зажим моделировался следующим образом. Атомы левой крайней атомной плоскости, перпендикулярной оси  $X$ , закреплялись в бигармоническом

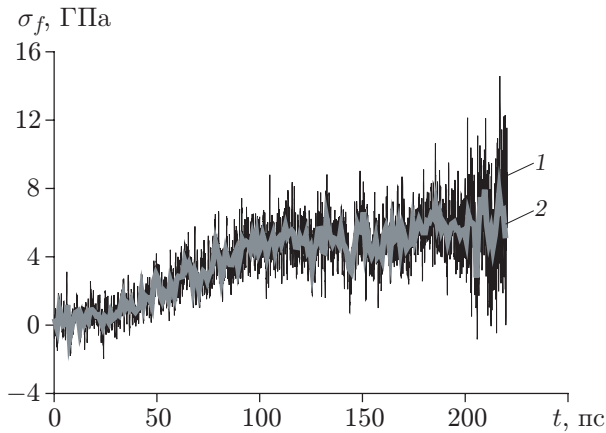


Рис. 3

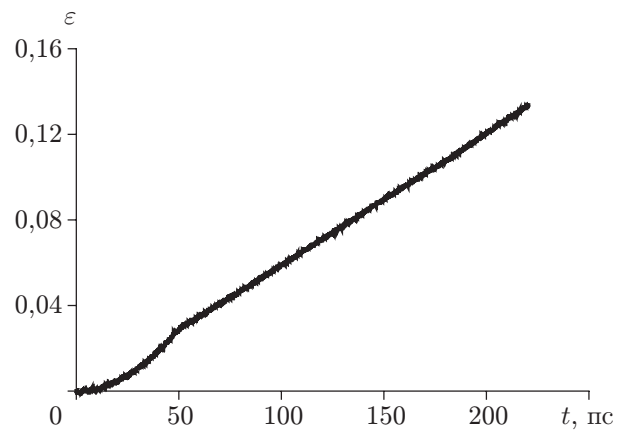


Рис. 4

Рис. 3. Рассчитанная (1) и осредненная по тепловым флуктуациям (2) зависимости внешнего напряжения на подвижном зажиме от времени

Рис. 4. Зависимость относительной деформации наноразмерного стержня от времени

потенциальном поле, потенциал которого имеет вид

$$V(\mathbf{r}_i) = k(x_i - x_i^0)^4/4.$$

При моделировании движения зажима предполагалось, что на все атомы крайней правой атомной плоскости, перпендикулярной оси  $X$ , действуют потенциальные силы, соответствующие точке минимума потенциала:

$$V(\mathbf{r}_i) = k(x_i - (x_i^0 + vt))^4/4. \quad (1)$$

Здесь  $x_i^0$  — координаты  $i$ -го атома грани после нагрева в начальный момент стадии одноосного растяжения с постоянной скоростью;  $x_i$  — координаты  $i$ -го атома в момент времени  $t$  в процессе деформации. Выражение  $x_i^0 + vt$  обеспечивает смещение минимума потенциала с мгновенной скоростью  $v$ . Таким образом, с помощью обобщенного нестационарного потенциала моделируются неподвижный и движущийся зажимы.

Для уменьшения амплитуды волновых процессов (обеспечения квазистатической деформации) множитель  $v$  увеличивался по линейному закону на интервале  $t = 0 \div 50$  пс от нуля до значения  $v = 10$  м/с.

При проведении анализа процесса деформации с постоянной скоростью рассчитывался ряд характеристик, которые с учетом значительных тепловых флуктуаций осреднялись по временным интервалам длительностью 2 пс.

На рис. 3 приведена зависимость напряжения на подвижном зажиме от времени. Амплитуда тепловых флуктуаций (линия 1) превышает среднее значение напряжения. Однако после осреднения по времени на интервалах длительностью 2 пс (линия 2) функция становится достаточно гладкой, что позволяет провести дальнейший анализ. Следует отметить, что при достижении заданного постоянного значения скорости движения зажима, равного 10 м/с, в интервале  $t = 0 \div 50$  пс происходит увеличение внешнего напряжения практически по линейному закону. Интервал времени  $t = 50 \div 100$  пс соответствует области упругой деформации, значение которой в момент  $t = 100$  пс равно  $\varepsilon = 0,06$  (рис. 4). В диапазоне  $t = 100 \div 180$  пс значение напряжения флуктуирует в окрестности постоянного значения (область пластического течения). При этом относительное удлинение увеличивается от значения  $\varepsilon \approx 0,06$  до значения  $\varepsilon \approx 0,09$ .

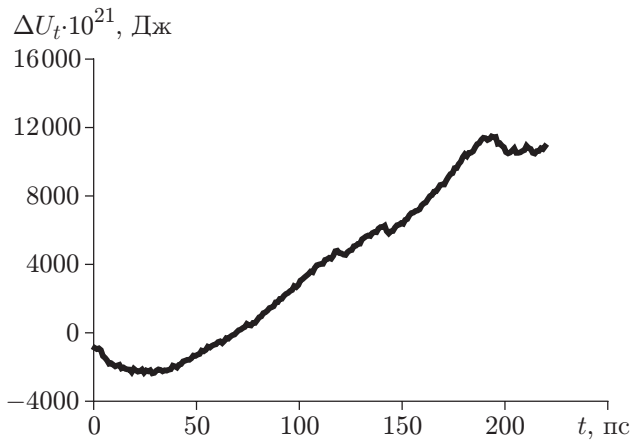


Рис. 5

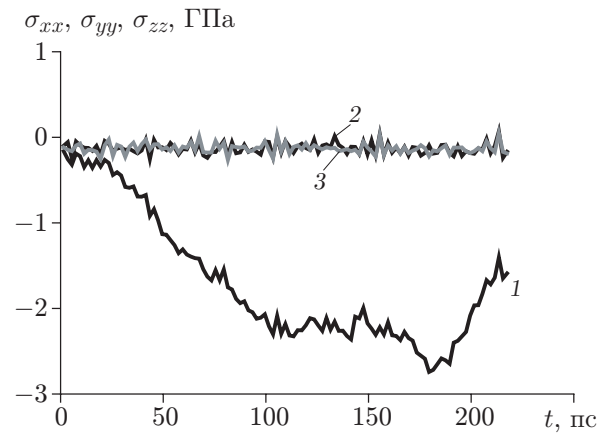


Рис. 6

Рис. 5. Зависимость изменения полной потенциальной энергии системы от времени на этапе квазистатического удлинения структуры

Рис. 6. Зависимости от времени диагональных компонент тензора напряжений  $\sigma_{xx}$  (1),  $\sigma_{yy}$  (2),  $\sigma_{zz}$  (3) в системе на этапе квазистатического удлинения структуры, рассчитанные с использованием теоремы вириала

Более подробные данные могут быть получены при анализе зависимости изменения потенциальной энергии структуры от времени (рис. 5). На интервале времени, в течение которого происходит ускорение правого зажима, внесение внешнего возмущения приводит к уменьшению потенциальной энергии, т. е. система переходит в состояние с более глубоким потенциальным минимумом. Затем до момента достижения величины относительного удлинения  $\varepsilon \approx 0,08$  (см. рис. 4) потенциальная энергия возрастает по параболическому закону, а в интервале  $0,08 \leq \varepsilon \leq 0,10$  она продолжает возрастать приблизительно по линейному закону. При  $\varepsilon \geq 0,1$  потенциальная энергия скачкообразно уменьшается, т. е. система переходит в состояние с более глубоким минимумом потенциальной энергии, и при дальнейшем увеличении  $\varepsilon$  остается приблизительно постоянной.

Для расчета компонент тензора напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$  использовалась теорема вириала. Расчет проводился для всех атомов включая поверхностные. Значения диагональных компонент тензора напряжений представлены на рис. 6. На интервале времени, соответствующем стационарному состоянию, значение компоненты  $\sigma_{xx}$  приблизительно в 25 раз больше значений компонент  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$ , которые с точностью до флуктуаций совпадают.

**4. Анализ процесса релаксации напряжения в наноструктуре.** Начальные данные для координат и импульсов атомов на этапе релаксации напряжения приняты равными соответствующим значениям на этапе квазистатического растяжения в момент времени  $t = 220$  пс, когда  $\varepsilon \approx 0,133$ . Затем скорости атомов в крайней правой плоскости, моделирующей взаимодействие атомов стержня с зажимами, моделируемыми обобщенными потенциалами (см. (1)), полагаются равными нулю (положение атомов фиксировалось в пространстве), а их координаты и импульсы исключались из уравнений движения. При этом боковые границы наностержня оставались свободными.

На рис. 7 приведена зависимость температуры системы от времени. Видно, что в процессе релаксации температура возрастает, т. е. энергия упорядоченных процессов переходит в тепловую энергию. При этом на интервале релаксации  $t = 0 \div 100$  пс температура растет достаточно быстро, на интервале  $t = 100 \div 500$  пс она увеличивается медленно. Поэтому представляет интерес исследование изменения потенциальной энергии взаимо-

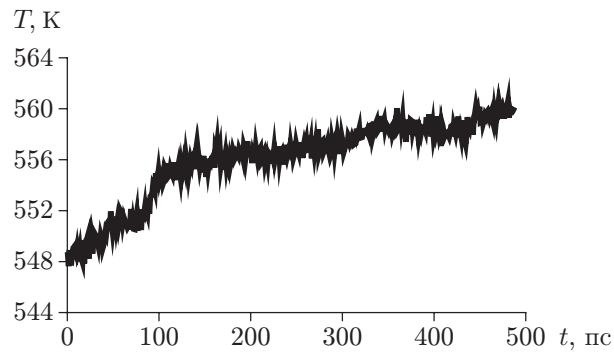


Рис. 7. Зависимость температуры объемных атомов в системе от времени в процессе релаксации

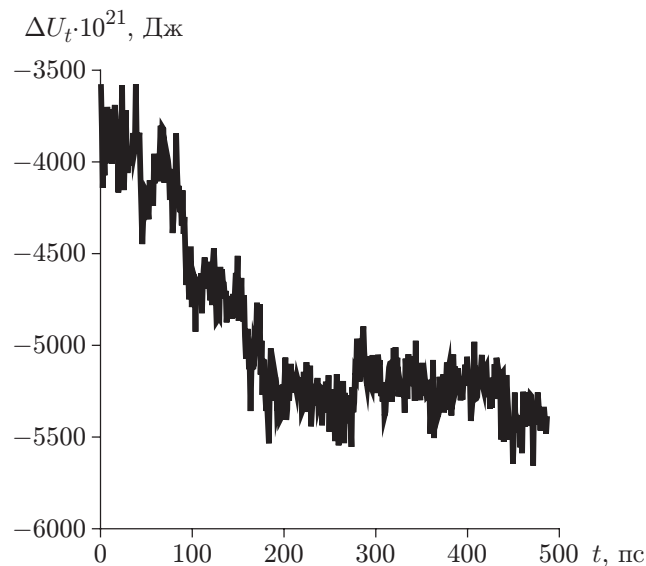


Рис. 8. Зависимость изменения полной потенциальной энергии атомов системы от времени в процессе релаксации

действия атомов системы (рис. 8). На рис. 8 видно, что при  $t < 300$  пс она уменьшается достаточно быстро, а затем — более медленно, выходя на асимптотическое постоянное значение. Это свидетельствует о том, что происходит релаксация напряжения. После снятия нагрузки система имеет высокую температуру и является замкнутой и изолированной. Наличие дефектов приводит к уменьшению потенциальных барьеров между разными кристаллическими состояниями. Все это обуславливает увеличение вероятности переходов атомов системы в состояние с меньшей потенциальной энергией. Выделяемая при этом энергия переходит в тепловую энергию или в кинетическую энергию хаотического движения, что приводит к увеличению температуры.

Ниже проведено исследование влияния данного процесса на компоненты тензора напряжения.

В расчетах использовались следующие приближения:

- объем системы  $V_c$  рассчитывался с учетом координат поверхностных атомов, положение которых в пространстве фиксировалось (атомы торцевых граней стержня);
- значение силы  $F_{ij}$ , действующей на  $i$ -й атом со стороны  $j$ -го, вычислялось так же, как в случае парного взаимодействия:  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ , при этом рассчитывался функционал плотности для многочастичной системы, в том числе для неподвижных атомов.

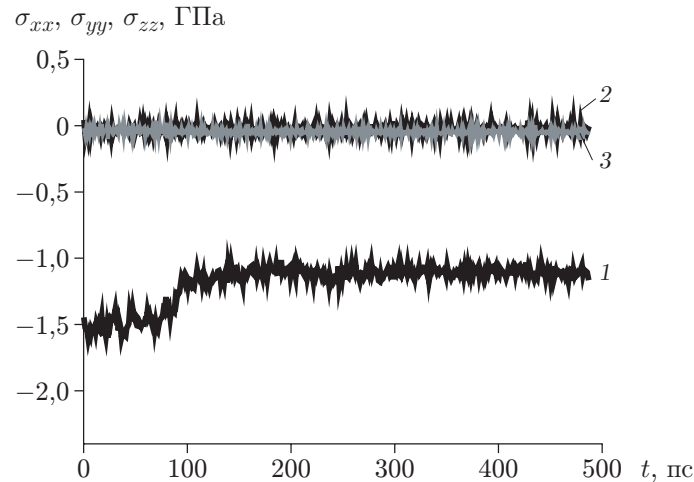


Рис. 9. Зависимости от времени диагональных компонент тензора напряжений  $\sigma_{xx}$  (1),  $\sigma_{yy}$  (2),  $\sigma_{zz}$  (3) в системе на этапе релаксации напряжения, рассчитанные с использованием теоремы вириала

На рис. 9 приведены зависимости диагональных компонент тензора напряжения от времени. Видно, что релаксация напряжения заканчивается в момент времени  $t \approx 150$  пс. При этом компонента  $\sigma_{xx}$  на этапе стационарной релаксации приблизительно на порядок больше компонент  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$ .

**5. Выводы.** Процесс формирования стационарного состояния на стадии фиксации зажимов включает несколько этапов.

Наименьшую длительность имеет процесс релаксации напряжения, затем устанавливается стационарное значение напряжения.

Более продолжительным является процесс перехода системы в состояние с более глубоким минимумом потенциальной энергии. Этот процесс включает две стадии: 1) быстрое уменьшение потенциальной энергии; 2) медленное уменьшение потенциальной энергии и выход на квазистационарное состояние.

Уменьшение потенциальной энергии системы сопровождается увеличением кинетической энергии хаотического движения атомов, т. е. увеличением температуры (происходит разогрев системы).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Kanel G. I., Zaretsky E. B., Razorenov S. V., et al. Evolutions of elastic-plastic shock compression waves in different materials // AIP Conf. Proc. 2017. V. 1793. 100030.
2. Barton N. R., Bernier J. V., Becker R., et al. A multiscale strength model for extreme loading conditions // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. 073501.
3. Voyiadjis G. Z., Abed F. H. Microstructural based models for bcc and fcc metals with temperature and strain rate dependency // Mech. Materials. 2005. V. 37, iss. 2/3. P. 355–378.
4. Селютина Н. С., Петров Ю. В. Прогнозирование динамического предела текучести металлов с помощью двух структурно-временных параметров // Физика твердого тела. 2018. Т. 60, вып. 2. С. 240–244.
5. Мержиевский Л. А., Шамонин С. А. Построение зависимости времени релаксации касательных напряжений от параметров состояния среды // ПМТФ. 1980. № 5. С. 170–179.

6. **Воронин М. С.** Упрощенный метод расчета параметров времени релаксации касательных напряжений на примере полимеров // Вычисл. методы и программирование. 2017. Т. 18, № 2. С. 146–157.
7. **Косенков В. М.** Определение релаксационных и дислокационных характеристик металлов по диаграммам ударного сжатия // ПМТФ. 2014. Т. 55, № 4. С. 33–42.
8. **Красников В. С., Куксин А. Ю., Майер А. Е., Янилкин А. В.** Пластическая деформация при высокоскоростном нагружении алюминия: многомасштабный подход // Физика твердого тела. 2010. Т. 52, вып. 7. С. 1295–1304.
9. **Groh S., Marin E. B., Horstemeyer M. F., Zbib H. M.** Multiscale modeling of the plasticity in an aluminum single crystal // Intern. J. Plasticity. 2009. V. 25, N 8. P. 1456–1473.
10. **Xu-Sheng Y., Yun-Jiang W., Guo-Yong W., et al.** Time, stress, and temperature-dependent deformation in nanostructured copper: Stress relaxation tests and simulations // Acta Materialia. 2016. V. 108. P. 252–263.
11. **Tomasz Z., Dariusz C.** Stress induced grain boundaries in thin Co layer deposited on Au and Cu // Appl. Phys. A: Materials Sci. Processing. 2016. V. 122, iss. 10. 908.
12. **Qingquan Q., Sheng Y., Guangming Ch., et al.** Recoverable plasticity in penta-twinned metallic nanowires governed by dislocation nucleation and retraction // Nature Comm. 2015. V. 6. 5983.
13. **Voter A. F.** Embedded atom method potentials for seven FCC metals: Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au, and Al: Tech. rep. / Los Alamos National Laboratory. N LA-UR 93-3901. Los Alamos, 1993.
14. **Головнева Е. И., Головнев И. Ф., Фомин В. М.** Моделирование квазистатических процессов в кристаллах методом молекулярной динамики // Физ. мезомеханика. 2003. Т. 6, № 6. С. 5–10.

*Поступила в редакцию 2/Х 2018 г.,  
после доработки — 2/Х 2018 г.  
Принята к публикации 25/III 2019 г.*

---