

УДК 539.22

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ ТИТАНА И АЛЮМИНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

С. П. Киселев, В. П. Киселев

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск
kiselev@itam.nsc.ru

Представлены результаты численного моделирования методом молекулярной динамики разрушения нанокристаллов титана, алюминия при одноосном растяжении в широком диапазоне температур $300 \div 1270$ К. Показано, что при растяжении нанокристаллов титана, нагретых до температуры выше 0.7 от температуры плавления в ненапряженном нанокристалле, сначала происходит фазовое превращение из кристаллического в жидкое состояние, а затем их разрушение. При растяжении нанокристалла алюминия данный эффект отсутствует.

Ключевые слова: молекулярная динамика, нанокристалл, титан, алюминий, разрушение, одноосное растяжение, нагрев, пластическая деформация.

DOI 10.15372/FGV20210412

ВВЕДЕНИЕ

Исследованию разрушения металлов при динамических и квазистатических нагрузках посвящено большое число работ, обзор которых можно найти, например, в [1, 2]. Разрушение металлического образца представляет собой сложный многостадийный процесс. Выделяют два предельных случая хрупкого и вязкого разрушения [1]. В твердых металлах под действием приложенной нагрузки происходит хрупкое разрушение, при котором пластические деформации малы. В этом случае, согласно Гриффитсу, основным механизмом является рост микротрещин под действием растягивающих напряжений в случае, когда запасенная упругая энергия превышает некоторое критическое значение. Рост микротрещин приводит к образованию макротрещины и разделению образца на отдельные части. В мягких металлах под действием приложенной нагрузки происходит вязкое разрушение. В этом случае в нагружаемом образце под действием сдвиговых напряжений происходит пластическая деформация, в результате чего возникают поры, рост и слияние которых приводят к возник-

новению макротрещины и разделению образца на части [2]. В алюминии разрушение происходит преимущественно по вязкому механизму, а в титане — по хрупкому механизму. В зависимости от температуры могут одновременно действовать оба указанных механизма разрушения. Интерес к титану и алюминию связан с широким применением этих материалов в машиностроении. Титан обладает высокими прочностными характеристиками, а алюминий хорошими пластическими свойствами.

При разрушении металлических образцов, имеющих размеры порядка нескольких нанометров, возникают некоторые особенности, которые не наблюдаются при разрушении макроскопических образцов. Они связаны с большими скоростями деформации порядка 10^{10} с⁻¹ и существенным влиянием поверхностных эффектов. Малые размеры и высокие скорости деформации затрудняют экспериментальное исследование разрушения наноразмерных образцов. Среди небольшого числа имеющихся экспериментальных исследований отметим работу [3], в которой была измерена откольная прочность алюминия при скорости деформации порядка 10^9 с⁻¹. Толщина пленки алюминия составляла 0.5, 0.76, 1.2 мкм, а воздействие на пластину создавалось фемтосекундным лазерным импульсом длительностью 150 фс.

В настоящее время основным методом исследования деформации и разрушения наноразмерных металлических образцов является

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-01-00292-а) и Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы (проект АААА-А17-117030610124-0).

© Киселев С. П., Киселев В. П., 2021.

метод молекулярной динамики (МД) [4, 5]. Имеется большое число публикаций, в которых используется этот метод, поэтому выделим лишь те работы, которые близки по тематике к данному исследованию. В работах [6, 7] методом МД исследовано разрушение стержня (нанопроволоки) Ti при комнатной температуре в широком диапазоне скоростей деформации $10^8 \div 10^{11} \text{ с}^{-1}$. Было показано, что при скоростях деформации меньше 10^{10} с^{-1} разрушению стержня Ti предшествует пластическая деформация, которая создается двойническими дислокациями. В результате пластической деформации возникает шейка, что приводит к разупрочнению материала и разрушению образца. При скоростях деформации больше 10^{10} с^{-1} при растяжении стержня происходит его аморфизация, поэтому фактически разрушается стержень из жидкого титана.

В работе [8] моделировалось методом МД разрушение образцов Ti, Al, а также композитов типа матрица — сферическое включение из Ti и Al при одноосном растяжении. В работе [9] методом МД моделировался рост ансамбля пор в Al при трехосном растяжении. В работе [8] исследовалось влияние различных потенциалов межатомного взаимодействия в Ti и Al [10–12] на результаты расчетов прочностных свойств этих металлов. В настоящее время достигнут большой прогресс в создании многочастичных потенциалов погруженного атома (EAM — embedded atom method) для моделирования взаимодействия атомов в металлах. Однако их верификация остается сложной проблемой. Из результатов расчетов в [8] следует, что отличие пределов прочности Al, рассчитанных с помощью различных потенциалов, составляет порядка 10 %. Кроме того, в [8] исследовано влияние скорости деформации и температуры образцов на их пределы прочности. В данной работе и в работе [8] для расчета атомных конфигураций использовался пакет LAMMPS [13]. Поэтому для верификации проводилось сравнение рассчитанных прочностных свойств Ti и Al с соответствующими результатами работы [8] при одном и том же потенциале взаимодействия [10], и получено их удовлетворительное совпадение.

В работе [14] с помощью пакета LAMMPS рассчитано соударение алюминиевого ударника с алюминиевой преградой. Методом МД исследована кинетика откольного разрушения монокристалла в волне разрежения при тем-

пературе $T = 100 \text{ К}$ и скорости деформации $6 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$. Показано, что разрушение происходит в два этапа. На первом этапе в ударной волне и волне разрежения в результате пластической деформации возникают поры октаэдрической формы, которые можно аппроксимировать эллипсоидами вращения. Размеры пор и расстояния между ними имеют значительный разброс. Поскольку поры образуются в полосах скольжения, то их характерные размеры на первом этапе достигают нескольких периодов решетки, а расстояния между ними — порядка расстояния между полосами скольжения. Из рис. 4 работы [14] видно, что при данной скорости деформации характерный размер пор порядка 2 нм, расстояние между порами 10 нм. На втором этапе, при достижении критического напряжения в волне разрежения, происходит рост пор, который заканчивается разрушением образца.

В данной работе моделируется сразу вторая стадия разрушения при растяжении монокристаллов Ti и Al. Рассматривается нанокристалл, который представляет собой характерную ячейку, содержащую одну цилиндрическую трещину. Размеры ячейки и трещины в данной постановке являются свободными параметрами. Ширина рассматриваемой ячейки 3.4 нм имеет размер порядка расстояния между эллиптическими порами, а диаметр трещины 0.8 нм — порядка периода решетки кристаллов. Известно [15], что рост поры начинается при критическом растягивающем давлении, когда материал вокруг поры переходит в пластическое состояние. В случае цилиндрической поры критическое давление равно произведению предела текучести на логарифм отношения расстояния между порами к их диаметру (соответствующая формула из [15] приведена ниже). В работе [14] это отношение равно 5, в данной работе — 4.25. Отсюда следует, что выбранные в данной работе размеры ячейки и трещины адекватно моделируют эллиптические поры, возникающие на первой стадии деформации металлов при пластической деформации (скорость деформации $6 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$).

Другая ситуация возникает при моделировании методом МД разрушения расплавленного материала в волне разрежения [16]. В этом случае на первом этапе при растяжении расплавленного материала сферические поры возникают в результате тепловых флуктуаций, поэтому они не могут быть заданы заранее и

должны быть рассчитаны методом МД. Отметим, что в данной работе сферические поры в расплаве титана рассчитываются методом МД при растяжении образца.

В [17, 18] методом МД с потенциалом [10] исследовалось разрушение интерметаллида $TiAl_3$ при одноосном растяжении. В работе [18] был обнаружен эффект возникновения фазового перехода при растяжении интерметаллида $TiAl_3$, нагретого до температуры выше $T = 1000$ К. Оказалось, что при растяжении интерметаллида $TiAl_3$ сначала происходит фазовый переход в жидкое аморфное состояние, а затем вязкое разрушение расплава. В данной работе представлены новые результаты исследования этого эффекта методом МД при одноосном растяжении нанокристаллов Ti и Al при различных температурах.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Численное моделирование приготовления образцов Ti и Al и их разрушения проводилось методом МД. Для расчета траекторий атомов Ti и Al использовался пакет LAMMPS [13], взаимодействие между атомами описывалось многочастичным EAM-потенциалом [10].

Численное моделирование осуществлялось в три этапа. На первом этапе методом МД создавались идеальные монокристаллы Ti и Al с цилиндрической трещиной. На втором этапе моделировался их нагрев до заданной температуры. На третьем этапе проводилось моделирование одноосного растяжения полученных образцов при заданной температуре. При растяжении образца в окрестности цилиндрической трещины происходила концентрация напряжений. Во многих случаях в окрестности цилиндрической трещины начиналось разрушение образца. На рис. 1 схематически показан образец с трещиной, представляющий собой прямоугольный параллелепипед с цилиндрическим отверстием.

Образец нанокристалла Ti состоял из атомов Ti , которые размещались в узлах идеальной *hcp*-решетки, а образец нанокристалла Al — из атомов Al , которые размещались в узлах идеальной *fcc*-решетки в параллелепипеде $-a/2 < x < a/2$, $-a/2 < y < a/2$, $-H/2 < z < H/2$. В середине приготовленных образцов было вырезано цилиндрическое отверстие (цилиндрическая трещина) радиуса R , ось которого была направлена вдоль оси y (см.

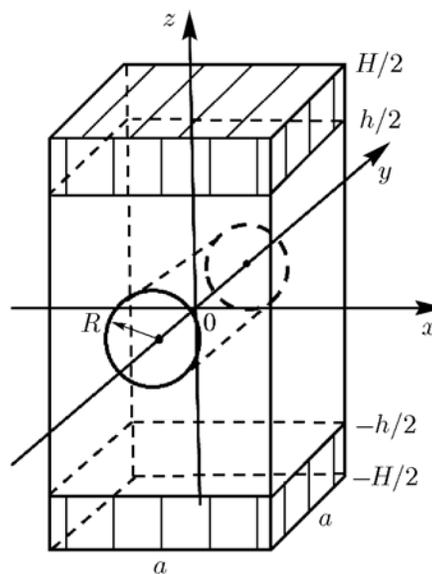


Рис. 1. Схема нагружаемого образца с цилиндрической трещиной

рис. 1). С помощью *NVT*-алгоритма [19] (постоянство количества частиц, объема, температуры) проводилось численное моделирование нагрева образцов Ti и Al до заданной температуры T . После нагрева образцов происходило их растяжение при постоянной температуре T вдоль оси z до момента разрушения. Растяжение образцов моделировалось путем задания постоянной скорости $\mp v_0$ атомам, находящимся в заштрихованных слоях ($-H/2 < z < -h/2$, $h/2 < z < H/2$, см. рис. 1). При одноосном растяжении каждого образца были рассмотрены два случая, соответствующие одноосно-деформированному и одноосно-напряженному состоянию образца.

При одноосном деформировании на боковых границах образцов ($x = \pm a/2$, $y = \pm a/2$) ставились условия периодичности. Этот случай соответствует растяжению тонкой пластины, боковые границы которой жестко зафиксированы. В этом случае при нагревании пластины в ней возникают температурные напряжения, которые переходят в растягивающие при растяжении пластины. При одноосно-напряженном состоянии боковые границы были свободными, поэтому при нагревании образца происходила релаксация напряжений. Этот случай соответствует растяжению стержня из ненапряженного состояния.

В образцах в каждый момент времени ме-

тодом МД рассчитывались координаты x_{ai} и скорости v_{ai} атомов, с помощью которых путем осреднения по объему находились макроскопические параметры в образце. По формулам, приведенным в [4, 5], рассчитывались температура T , средние напряжения σ_{ij} , давление $p = -\sigma_{ii}/3$ и второй инвариант девиатора тензора напряжений

$$\sigma_d = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{yy})^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2) \right]^{1/2}.$$

Деформация образца определялась по формуле $e = 2v_0\Delta t/H$, где Δt — время растяжения образца. Средняя потенциальная энергия, приходящаяся на один атом, вычислялась по формуле

$$U_{atom} = \sum_{i=1}^N U_i/N,$$

где U_i — потенциальная энергия i -го атома, N — число атомов в образце. Средняя радиальная функция распределения в сечении z_i вычислялась по формуле

$$\text{RDF}(z_i, r) = \sum_{i=1}^{\Delta N} g(r)/\Delta N,$$

где $g(r)$ — радиальная функция распределения, ΔN — число атомов, попадающих в слой $z_i - \Delta \leq z \leq z_i + \Delta$.

Численные расчеты проводились при следующих геометрических размерах образцов: $a = 34 \text{ \AA}$, $H = 160 \text{ \AA}$, $h = 152 \text{ \AA}$, радиус отверстия $R = 4 \text{ \AA}$. Полуширина слоя осреднения радиальной функции $\Delta = 4 \text{ \AA}$. Скорость растяжения образца — $v_0 = 0.5 \text{ \AA/пс}$, соответствующая скорость деформации — $\dot{\epsilon}_z = 2v_0/H = 6.25 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$.

Для анализа результатов расчетов ниже на рисунках приведены атомные конфигурации в плоскостях (x, z) и (y, z) . Поскольку в молекулярной динамике рассматривается дискретная система атомов, то атомная конфигурация в плоскости (x, z) означает, что на соответствующем рисунке в проекции (x, z) показаны атомы, находящиеся в слое $-4 < y < 4 \text{ \AA}$. Атомная конфигурация в плоскости (y, z) означает, что на соответствующем рисунке в проекции (y, z) показаны атомы, находящиеся в слое $-4 < x < 4 \text{ \AA}$.

2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ

Ниже приведены результаты численного моделирования разрушения в образцах нанокристаллов Ti и Al.

2.1. Разрушение нанокристалла Ti

Сначала были найдены температуры плавления нерастянутой пластины и нерастянутого стержня Ti, которые имели одинаковые размеры, указанные выше. Для этого были решены две задачи о нагреве и плавлении пластины и стержня Ti. На боковых границах пластины Ti ставились условия периодичности, а боковые границы стержня Ti были свободны от напряжений. В обоих случаях нижняя граница образцов была фиксирована, а верхняя свободна. При данных размерах образцов температура плавления пластины Ti равна $T_{Ti}^m \approx 1700 \text{ К}$, а температура плавления стержня $T_m = 1560 \text{ К}$.

Затем были решены четыре задачи об изотермическом растяжении нанокристалла Ti при различных температурах. Растяжение проводилось вдоль оси z , которая совпадала с направлением оси $[0001]$ в нанокристалле Ti. В задаче 1 моделировалось растяжение пластины при $T = 300 \text{ К}$ (на боковых границах нанокристалла задавались периодические граничные условия). В задаче 2 моделировалось растяжение пластины при $T = 1430 \text{ К}$ (на боковых границах нанокристалла задавались периодические граничные условия). В задаче 3 моделировалось растяжение стержня при $T = 300 \text{ К}$ (боковые границы нанокристалла свободны от напряжений). В задаче 4 моделировалось растяжение стержня при $T = 1330 \text{ К}$ (боковые границы нанокристалла свободны от напряжений).

Задача 1 о растяжении пластины при $T = 300 \text{ К}$ (периодические граничные условия в нанокристалле Ti). На рис. 2 показаны атомные конфигурации, возникающие в нанокристалле Ti при его растяжении в моменты времени t_i , которым соответствует деформация $e = t_i \dot{\epsilon}_z$. Внутри нанокристалла Ti, за исключением малой окрестности поры, реализуется однооснодеформированное состояние. На рис. 3, а, б приведены зависимости от деформации e компонент тензора напряжений $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$, второго инварианта девиатора напряжений σ_d , обратного давления $-p$ и средней внутренней энергии U_{atom} , приходящейся на один атом. На

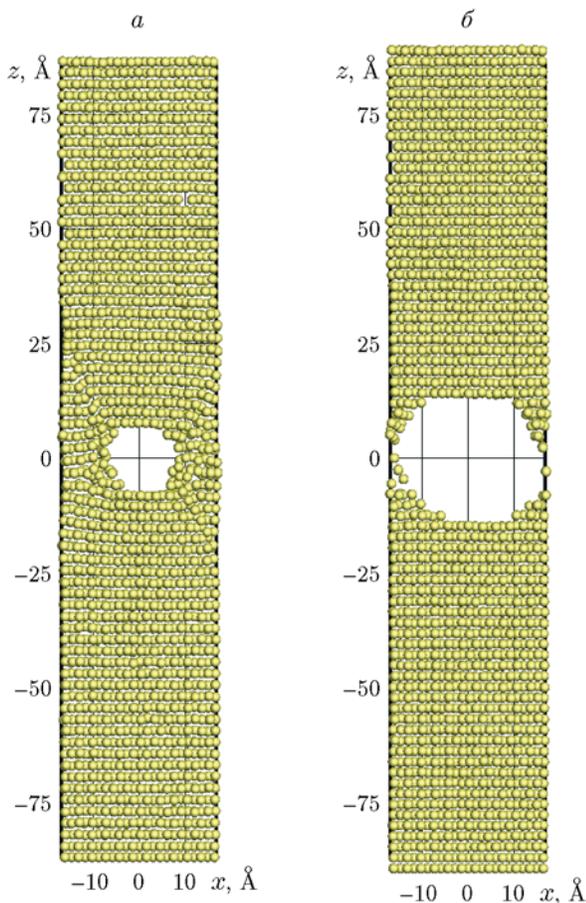


Рис. 2. Атомные конфигурации в нанокристалле титана при $T = 300$ К в плоскости (x, z) в различные моменты времени:

a — $t = 0.0126$ нс ($e = 0.084$), b — $t = 0.0198$ нс ($e = 0.132$)

рис. 3,б показана зависимость $RDF(r)$ в сечении $z_1 = -56$ Å после разрушения нанокристалла Ti в момент $t = 0.0198$ нс (деформация $e = 0.132$).

Из рис. 2, 3 видно, что предел прочности пластины титана $\sigma^* = \sigma_{zz}^* \approx 13$ ГПа достигается при деформации $e_* = 0.075$, когда начинается рост цилиндрической трещины. Если деформация меньше $e < e_* = 0.075$, то $\sigma_{zz} < \sigma_{zz}^* \approx 13$ ГПа и растяжение образца происходит упруго. Введем тензорные обозначения для осей декартовой системы координат: 1 = x , 2 = y , 3 = z . В этих обозначениях связь тензора напряжений и тензора деформаций определяется из закона Гука $\Delta\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$, где $\Delta\sigma_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{ij}^0$, σ_{ij}^0 — напряжение в образце перед растяжением. В данном случае отлична от нуля одна компонента тензора деформации $\varepsilon_{33} = e$.

Используя обозначения Фойгта, из рис. 3,а находим значения упругих модулей титана $C_{33} = (\Delta\sigma_{zz}/e)|_{e \rightarrow 0} \approx 194$ ГПа, $C_{13} \approx 66.7$ ГПа, $C_{23} \approx 80$ ГПа. Модуль объемного сжатия равен $K = -\Delta\sigma_{ii}/(3e) = (C_{13} + C_{23} + C_{33})/3 \approx 113.6$ ГПа. Полученные значения упругих констант хорошо согласуются с упругими модулями Ti, полученными из первых принципов [20]: $C_{33} = 190.5$ ГПа, $C_{13} \approx 68.3$ ГПа. При упругом деформировании внутренняя энергия является квадратичной функцией от деформации $U - U_0 = C_{33}e^2/2$. Используя найденное значение C_{33} , оценим изменение упругой энергии одного атома при деформации $e = e_* = 0.075$ по формуле $\Delta U_{atom} = C_{33}e_*^2/2N_a \approx 0.053$ эВ, где $N_a \approx 5.66 \cdot 10^{28}$ м⁻³ — число атомов Ti в 1 м³. Эта оценка хорошо согласуется с приращением энергии одного атома, полученным в численном расчете (см. рис. 3,б) $\Delta U_{atom}^{calc} = 0.06$ эВ. При дальнейшем растяжении $e > e_*$ в окрестности цилиндрической трещины развивается пластическая деформация (см. рис. 2,а). Когда граница области, в которой происходит пластическая деформация, выходит на боковые границы образца, начинается рост трещины. Рост трещины сопровождается упругой разгрузкой в виде уменьшения напряжений и упругой энергии в образце. При выходе трещины на боковые границы образца происходит его разрушение путем разделения на две части (см. рис. 2,б).

В разрушенных образцах атомная решетка близка к идеальной решетке Ti (см. рис. 3,в). При разрушении запасенная упругая энергия вызывает упругие колебания образца, что приводит к осцилляциям упругой энергии (см. рис. 3,б) и второго инварианта девиатора напряжений σ_d (см. рис. 3,а). Зависимость $\sigma_d(e)$ имеет два одинаковых максимума $\sigma_d' = 3.2$ ГПа при $e = 0.075$ и 0.105 (см. рис. 3,а). Первый максимум обусловлен возникновением пластической деформации при растяжении образца, а второй — при сжатии после его разрушения. Отсюда следует, что предел текучести титана при растяжении и сжатии является одинаковым. Переход к пластическому деформированию происходит при выполнении условия Мизеса [15] $\sigma_d' = (2/\sqrt{3})\tau_s$, где τ_s — предел текучести при сдвиге. Подставив сюда значение $\sigma_d' = 3.2$ ГПа, получим значение предела текучести $\tau_s = 2.81$ ГПа при одноосном растяжении (сжатии) со скоростью деформации $\dot{\varepsilon}_z = 6.25 \cdot 10^9$ с⁻¹. Это значение совпадает

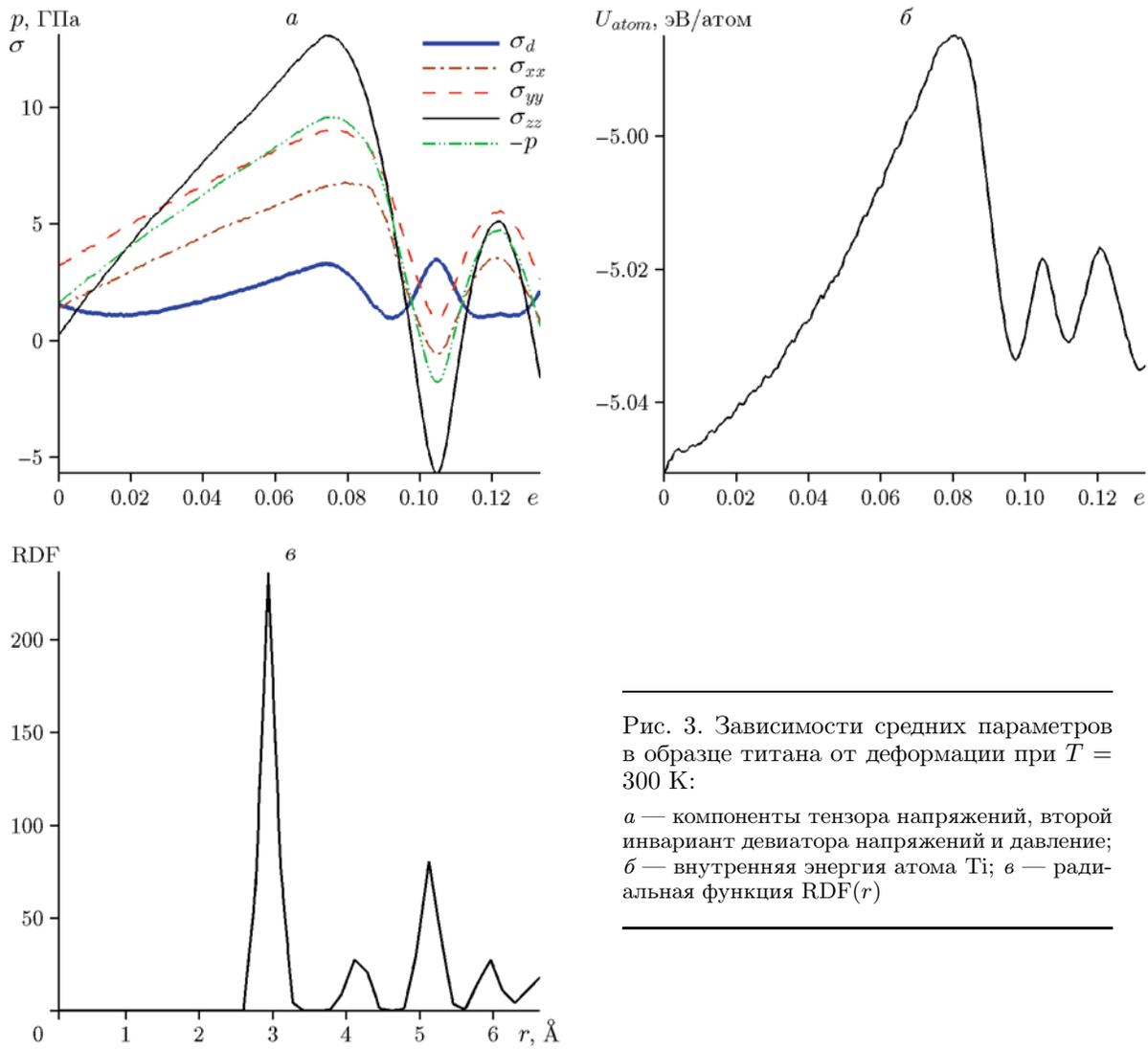


Рис. 3. Зависимости средних параметров в образце титана от деформации при $T = 300$ К:

a — компоненты тензора напряжений, второй инвариант девиатора напряжений и давление; *б* — внутренняя энергия атома Ti; *в* — радиальная функция $\text{RDF}(r)$

с пределом текучести $\tau_s = 2.82$ ГПа из эксперимента [21]. В этом эксперименте рассматривалось распространение ультракороткой волны сжатия, которая создавалась при облучении пленки титана фемтосекундным лазерным импульсом. Волна сжатия расщеплялась на упругий предвестник и пластическую ударную волну, в которых происходила одноосная деформация. Скорость деформации в волне сжатия оценим по формуле $\dot{\epsilon}_z = \frac{\partial u_p}{\partial z} = \frac{\Delta u_p}{\Delta z}$, где $\Delta u_p = \Delta u_{fs}/2$, $\Delta z = U_S \Delta t$. Из рис. 5 из [21] найдем приращение скорости свободной поверхности $\Delta u_{fs} \approx 0.7$ км/с за время $\Delta t \approx 10$ пс и скорость ударной волны $U_S \approx 6.5$ км/с. Подставив эти значения в формулу для скорости деформации,

получим, что в [21] предел текучести определен при скорости деформации $\dot{\epsilon}_z \approx 5.3 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$. Это значение близко к скорости деформации в данной работе.

Рост цилиндрической трещины начинается при критическом давлении, когда границы пластической области выходят на боковые границы образца. Критическое давление в этом случае определяется по формуле [15] $p^* = 2\tau_s \ln(a/2R)$. Подставив сюда найденное выше значение $\tau_s = 2.81$ ГПа, для заданных параметров a и R получим оценку $p^* \approx 8.15$ ГПа, которая удовлетворительно согласуется с расчетом $-p_{\max} = -p^* \approx 9.2$ ГПа (см. рис. 3, *a*). Отметим, что при разрушении наноразмерного образца титана при $T = 300$ К (см. рис. 2) пла-

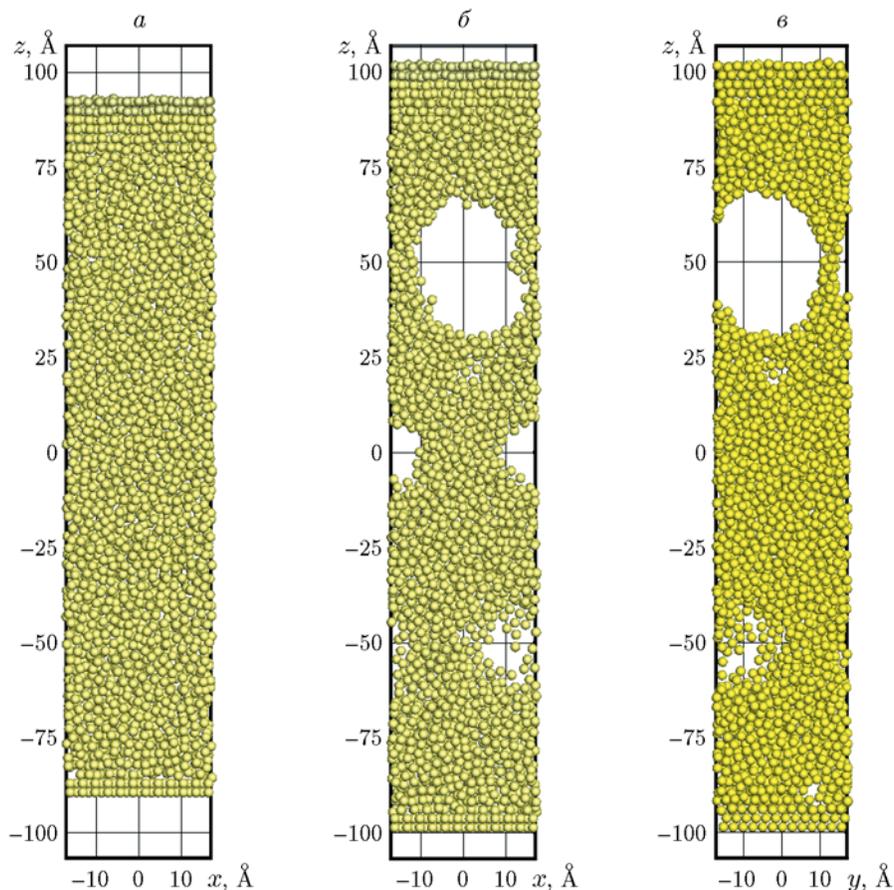


Рис. 4. Атомные конфигурации титана при $T = 1430$ К в плоскости (x, z) в различные моменты времени:

a — $t = 0.0138$ нс ($e = 0.092$), $б$ — $t = 0.024$ нс ($e = 0.16$), $в$ — атомная конфигурация в плоскости (y, z) , $t = 0.024$ нс

стическая деформация происходит в окрестности трещины $\Delta z \sim a$, поэтому это разрушение относится к хрупкому типу.

Задача 2 о растяжении пластины при $T = 1430$ К (периодические граничные условия в нанокристалле Ti). На рис. 4 показаны атомные конфигурации в нанокристалле Ti при $T = 1430$ К в моменты времени 0.0138 и 0.024 нс. На рис. 5, *а, б* приведены зависимости компонент тензора напряжений и внутренней энергии U_{atom} от деформации, на рис. 5, *в* — зависимость RDF(r) в сечении $z_1 = -56$ Å нанокристалла Ti в момент времени $t = 0.0135$ нс (деформация $e = 0.09$).

Численные расчеты показывают, что в нанокристалле Ti при малой деформации ($e < 0.04$, $\sigma_{zz} < 4.8$ ГПа) происходит упругое деформирование, за исключением малой окрестности трещины. В окрестности трещины развивается пластическое деформирование, при кото-

ром наблюдается затекание поры, поэтому при дальнейшем деформировании трещина в образце отсутствует (см. рис. 4, *а*). Зависимость напряжения от деформации в этом случае также является линейной $\sigma_{zz} = C'_{33}e$, но «эффективный упругий модуль» понижается и равен $C'_{33} = \sigma_{zz}/e \approx 120$ ГПа. При дальнейшем растяжении в интервале $0.04 < e < 0.09$ зависимость $\sigma_{zz} = \sigma_{zz}(e)$ становится немонотонной и содержит участок $0.06 < e < 0.08$, на котором происходит разупрочнение материала $\frac{d\sigma_{zz}}{de} < 0$ (см. рис. 5, *а*). Немонотонная зависимость $\sigma_{zz} = \sigma_{zz}(e)$ указывает на фазовое превращение в образце на участке деформирования $0.04 < e < 0.09$. Для выяснения структуры материала после протекания фазового перехода была вычислена радиальная функция RDF(r) при деформации $e = 0.09$. Из рис. 5, *в* видно, что после фазового перехода образец Ti

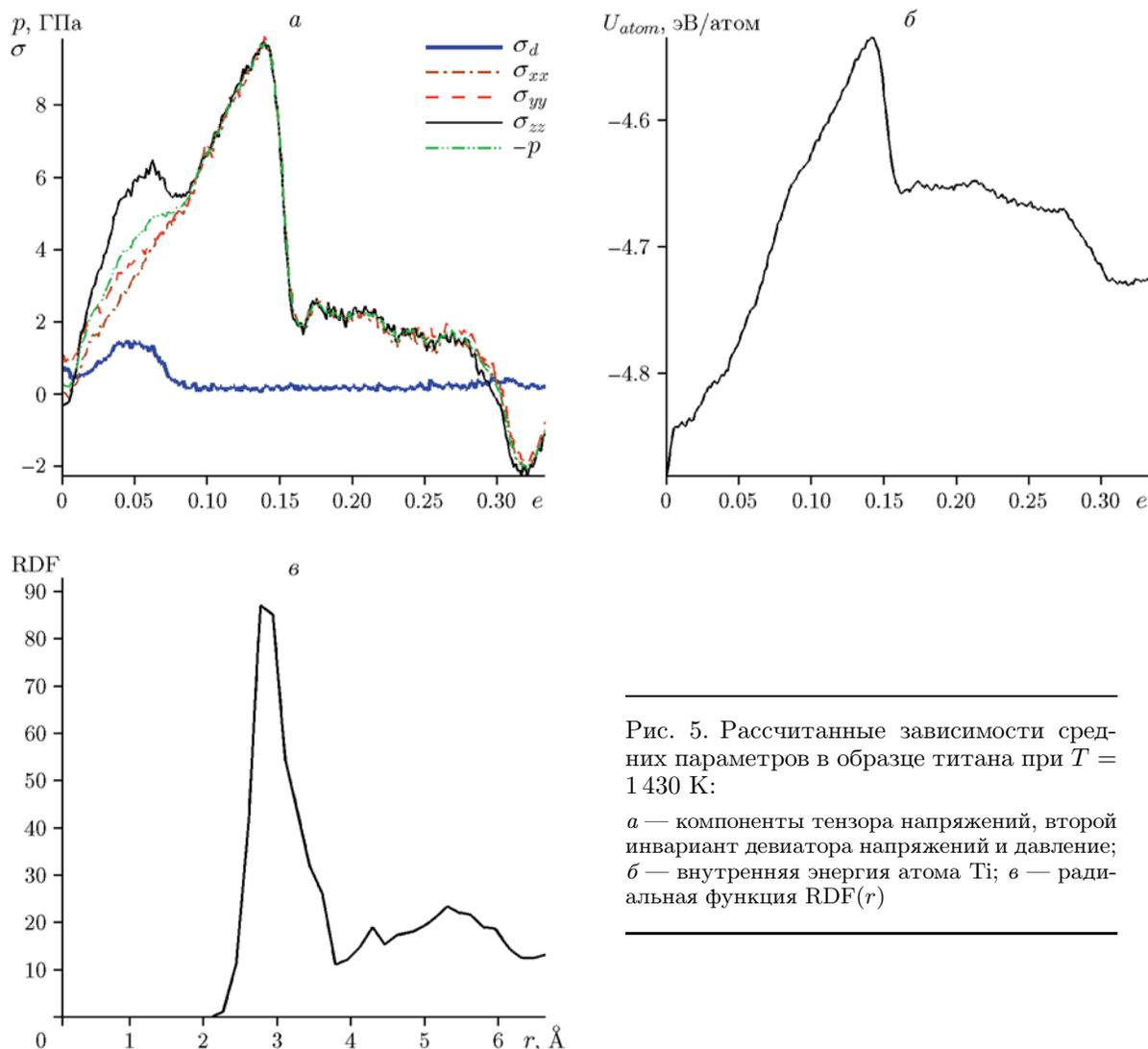


Рис. 5. Рассчитанные зависимости средних параметров в образце титана при $T = 1430$ К:

a — компоненты тензора напряжений, второй инвариант девиатора напряжений и давление; $б$ — внутренняя энергия атома Ti; $в$ — радиальная функция $RDF(r)$

имеет аморфную атомную структуру. Аморфная структура наблюдается также на рис. 4, б, где приведена атомная конфигурация на ниспадающей ветви $\frac{d\sigma_{zz}}{de} < 0$ при $e = 0.16$. Из рис. 5, а видно, что при $e = 0.09$ касательные напряжения обращаются в нуль ($\sigma_d = 0$). Отсюда следует, что при растяжении образца в интервале $0.04 < e < 0.09$ происходит плавление нанокристалла Ti, что приводит к излому на зависимости $U_{atom}(e)$ в точке $e = 0.09$ (см. рис. 5, б). Данный эффект возникает за счет того, что температура плавления $T_m \approx 1420$ К растянутого материала при $\sigma_{zz} \approx 5$ ГПа меньше, чем температура плавления нерастянутого материала $T_m = 1700$ К при $\sigma_{zz} = 0$ (расчеты температуры плавления нагруженного об-

разца выполнялись для потенциала [10]). Отметим, что эффект уменьшения температуры плавления при растяжении привлекался ранее в работе [22] при анализе микроструктуры разрушенных образцов при одноосном растяжении в волне разрежения. В этой работе проводились эксперименты по откольному разрушению в оловянных пластинах, в которых наблюдался рост пор в расплаве при интенсивном лазерном воздействии.

При дальнейшем растяжении образца ($e > 0.09$) все компоненты тензора напряжений увеличиваются по линейному закону и равны между собой $\sigma_{zz} = \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = -p = Ke$. Объемный модуль сжатия в расплаве меньше «эффективного упругого модуля», $K < C'_{33}$. В

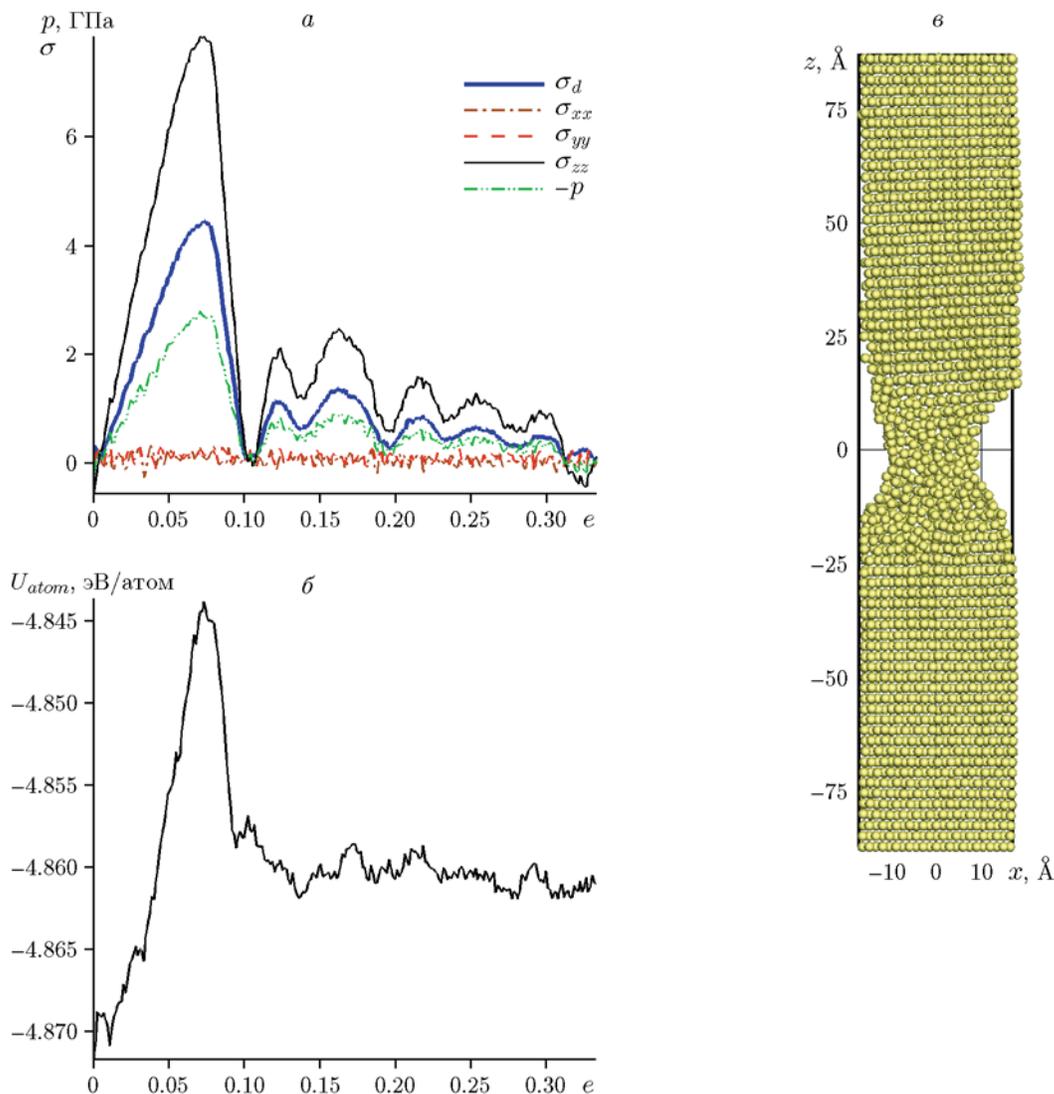


Рис. 6. Рассчитанные зависимости средних параметров в образце титана при $T = 300$ К: a — компоненты тензора, второй инвариант девиатора напряжений и обратное давление; b — внутренняя энергия атома Ti; c — атомная конфигурация в плоскости (x, z) при $e = 0.075$

растягиваемом расплавленном образце происходят флуктуации плотности, в результате которых возникают сферические поры, показанные на рис. 4, б, в. При критическом напряжении $\sigma_{zz}^* = -p^* \approx 10$ ГПа начинается рост пор в расплаве. Из рис. 4, б, в видно, что наиболее быстро растет сферическая пора, центр которой находится в точке с координатами $x = 0$, $y = -5$ Å, $z = 50$ Å. Выход поры на боковую границу образца приводит к разупрочнению материала $\frac{d\sigma_{zz}}{de} < 0$ и его разделению на отдельные части (см. рис. 4, б). Отсюда следует, что разрушение нагретого монокристалла

Ti идет по вязкому механизму. Сначала при $\sigma_1^* \approx 5$ ГПа происходят плавление материала и релаксация касательных напряжений, затем при $\sigma^* \approx 10$ ГПа — рост пор и релаксация давления. Из рис. 5, а видно, что $\sigma^* \approx 10$ ГПа определяет предел прочности расплавленного титана.

Задача 3 о растяжении стержня при $T = 300$ К (боковые границы образца Ti свободны от напряжений). В этом случае внутри нанокристалла Ti реализуется однонапряженное состояние $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0$. На рис. 6 приведены зависимости $\sigma_{ij}(e)$, $U_{atom}(e)$ и атомная конфигурация при $e = 0.075$.

Из рис. 6,а видно, что при $T = 300$ К предел прочности стержня титана $\sigma^* \approx 7.87$ ГПа достигается при деформации $e_* = 0.075$, когда образуется шейка. При $e < 0.07$ напряжение σ_{zz} линейно зависит от деформации, а энергия квадратично зависит от деформации. Это означает, что при растяжении образца в нем развивается упругая деформация, за исключением малой области в окрестности цилиндрической трещины, где происходит ее закрытие. Затем при $e = 0.075$ в области, где была трещина, образуется шейка (рис. 6,б), что приводит к разупрочнению материала, при котором напряжение σ_{zz} в образце уменьшается до нуля. При дальнейшем растяжении образца шейка утончается до тех пор, пока образец не распадается на две части. Как отмечалось выше, сначала средняя внутренняя энергия, приходящаяся на один атом $U_{atom}(e)$, увеличивается с ростом деформации e и достигает максимального значения перед образованием шейки (рис. 6,б). После образования шейки U_{atom} резко уменьшается до некоторого значения U'_{atom} , которое затем практически не меняется с увеличением деформации. Отметим, что U'_{atom} больше, чем $U_{atom}(0)$ в начальном недеформированном состоянии ($e = 0$). Это связано с тем, что после разрушения образца часть энергии оказывается запасенной в искажениях атомной решетки, создаваемых дефектами, которые возникли в результате пластической деформации в окрестности шейки. За исключением области шейки, деформация в образце была упругая, поэтому при $T = 300$ К происходит хрупкое разрушение нанокристалла Ti с образованием шейки. Сравнение с результатами, полученными в задаче 1, показывает, что при $T = 300$ К предел прочности пластины почти в два раза больше, чем предел прочности стержня. Это связано с тем, что в стержне большее число атомов находится на свободной поверхности, что облегчает зарождение шейки при его растяжении.

При растяжении стержня (образец со свободными боковыми границами) в основном объеме образца реализуется одноосное напряжение. В этом случае связь тензора напряжений с тензором деформации дается выражением $\sigma_{zz} = Ee$, где $E = 9KG/(3K + G)$ — модуль Юнга, K — модуль объемного сжатия, G — модуль сдвига [23]. Из рис. 6,а находим, что $E \approx 133$ ГПа, откуда из формулы для модуля Юнга и найденного выше значения $K \approx 113.6$ ГПа вычисляем $G \approx 51$ ГПа. Полученные

значения упругих констант титана удовлетворительно согласуются с упругими константами $K = 108$ ГПа, $G = 41.5$ ГПа, приведенными в [24], и значениями $K = 93.5 \pm 0.6$ ГПа, $G \approx 41.5 \pm 0.6$ ГПа из работы [8].

В работе [6] методом МД моделировалось одноосное растяжение стержня наноразмерного титана вдоль оси [0001] при $T = 300$ К и различных скоростях деформации $10^8 \leq \dot{\epsilon} < 10^{11}$ с⁻¹. Численные расчеты проводились с помощью пакета LAMMPS, а взаимодействие атомов Ti описывалось потенциалом Финнива — Синклера. На рис. 2 в работе [6] приведены зависимости $\sigma_{zz}(e)$ при различных скоростях деформации, которые подобны зависимости $\sigma_{zz}(e)$ на рис. 6,а. Из рис. 2 в [6] можно найти предел прочности стержня титана $\sigma^* \approx 5.8$ ГПа, который достигается при скорости деформации $\dot{\epsilon} = 5 \cdot 10^9$ с⁻¹. Это значение меньше предела прочности стержня титана $\sigma^* \approx 7.87$ ГПа, полученного в данной работе, при $\dot{\epsilon} = 6.25 \cdot 10^9$ с⁻¹. Отличие может быть связано с использованием различных потенциалов межатомного взаимодействия: в работе [6] использовался потенциал [25], в данной работе — потенциал [10].

Задача 4 о растяжении стержня Ti при $T = 1330$ К (боковые границы образца Ti свободны от напряжений). На рис. 7 показаны атомные конфигурации, возникающие в нанокристалле Ti при его растяжении. На рис. 8 приведены зависимости компонент тензора напряжений и внутренней энергии U_{atom} от деформации.

Из рис. 8,а видно, что при $T = 1330$ К предел прочности стержня титана $\sigma^* \approx 1.97$ ГПа достигается при деформации $e_* = 0.034$. При $e < 0.034$ в образце развивается упругая деформация, за исключением области трещины, где происходит ее закрытие. При $e \geq 0.034$ материал на месте трещины плавится и образуется шейка, что приводит к падению напряжения в образце. При дальнейшем растяжении размер шейки увеличивается и охватывает большую часть образца (см. рис. 7,а). С ростом шейки увеличивается область, занятая жидким Ti, что приводит к монотонному уменьшению средних касательных напряжений $\frac{d\sigma_d}{de} < 0$ (рис. 8,а). Расплавленный Ti растягивается до тех пор, пока не произойдет разрыв шейки при $e = 0.43$ (см. рис. 7,б), после чего образец разделяется на части. Отметим, что при растяже-

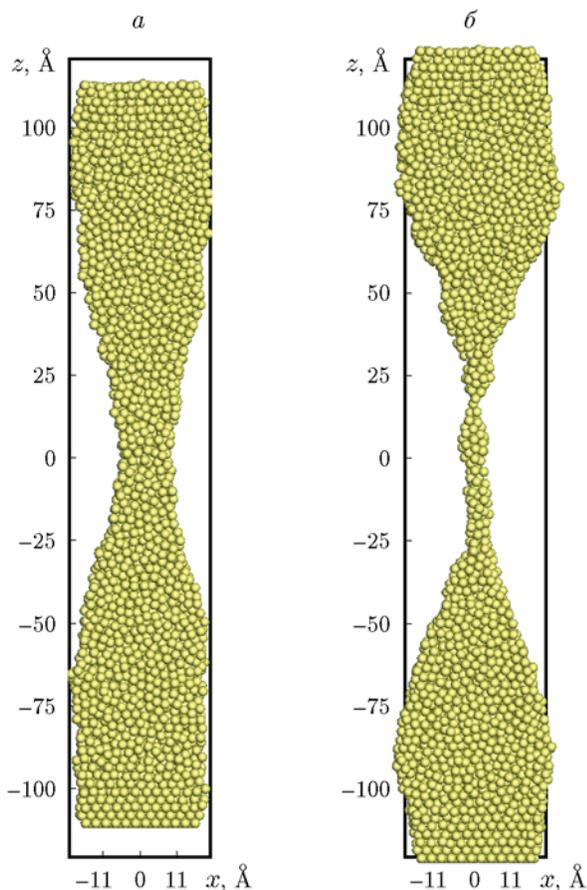


Рис. 7. Атомные конфигурации в нанокристалле титана при $T = 1330$ К в плоскости (x, z) :

$a - e = 0.267$, $b - e = 0.43$

нии образца средняя внутренняя энергия возрастает до момента разрыва шейки (рис. 8, б). Из приведенных на рис. 7, 8 результатов расчетов следует, что при одноосном растяжении образца нанокристалла Ti со свободными боковыми границами, нагретого до температуры $T = 1330$ К, сначала происходит плавление нанокристалла Ti в области шейки, а затем вязкое разрушение расплавленного Ti путем разрыва шейки. Сравнение с результатами, полученными в задаче 2, показывает, что предел прочности нагретого до $T = 1330$ К стержня почти в пять раз меньше, чем предел прочности нагретой до $T = 1430$ К пластины. Это связано с более низкой температурой плавления стержня по сравнению с пластиной. Как было показано выше, в нерастянутом стержне $T_m = 1560$ К, а в нерастянутой пластине $T_m = 1700$ К. Видно, что температура плавления зависит не только от напряжения,

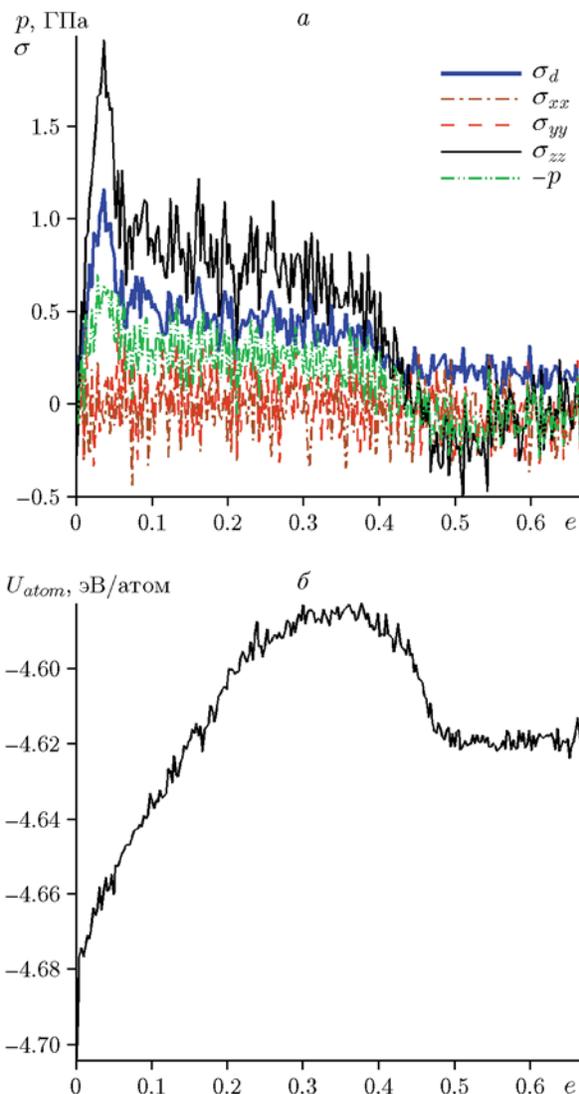


Рис. 8. Рассчитанные зависимости средних параметров в образце титана при $T = 1330$ К:

a — компоненты тензора, второй инвариант дивергента напряжений и обратное давление; b — внутренняя энергия атома Ti

но и от граничных условий на поверхности образца. В стержне большее число атомов находится на свободной поверхности, что приводит к уменьшению температуры плавления стержня по сравнению с пластиной.

2.2. Разрушение нанокристалла Al

Сначала была решена задача о нагреве и плавлении нерастянутого образца нанокристалла Al. Рассчитанная температура плавления нанокристалла Al равна $T_{Al}^m \approx 935$ К. Затем были решены задачи 5 и 6 об изотерми-

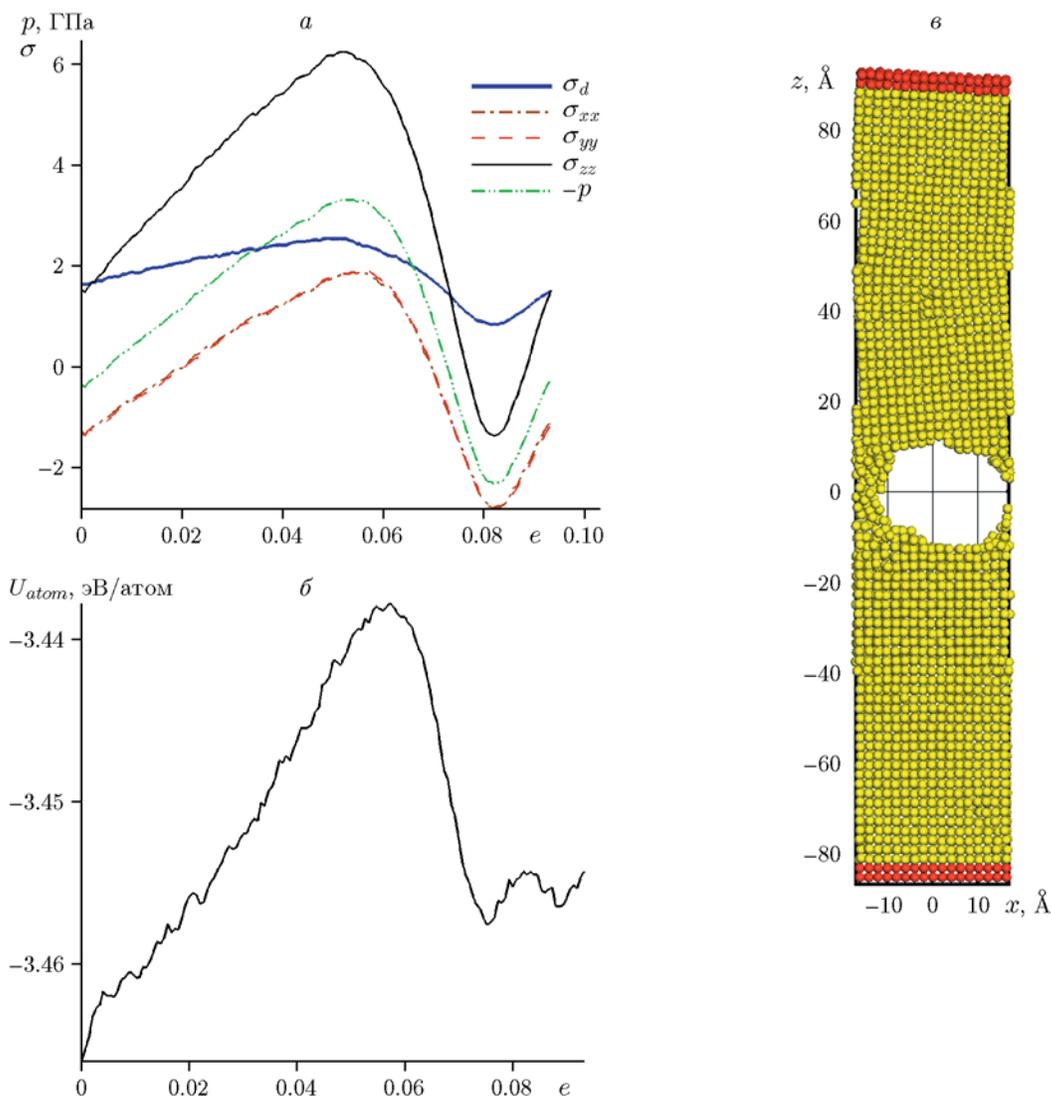


Рис. 9. Рассчитанные зависимости средних параметров в образце алюминия от деформации при $T = 300$ К:

a — компоненты тензора, второй инвариант девиатора напряжений и обратное давление; b — внутренняя энергия атома Al; c — атомная конфигурация при $e = 0.076$ (красным цветом отмечены атомы Al, которые движутся с постоянной скоростью $\mp v_0$)

ческом растяжении нанокристалла Al. Растяжение проводилось вдоль оси z , которая совпала с направлением оси $[001]$ в нанокристалле Al. В задаче 5 растяжение происходило при $T = 300$ К, а в задаче 6 — при $T = 650$ К. В обеих задачах на боковых границах образца задавались периодические граничные условия. Как отмечалось выше, это соответствует одноосному растяжению пластины, боковые границы которой закреплены.

Задача 5 о растяжении образца Al при $T = 300$ К. Внутри нанокристалла Al, за ис-

ключением малой окрестности поры, реализуется одноосно-деформированное состояние. На рис. 9 приведены зависимости от деформации e компонент тензора напряжений $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$, второго инварианта девиатора напряжений σ_d , обратного давления $-p$, средней внутренней энергии U_{atom} и атомная конфигурация в момент разрушения при $T = 300$ К.

Из рис. 9, a, b следует, что при $T = 300$ К критическое напряжение разрушения $\sigma^* \approx 6.3$ ГПа. При $e < e_* = 0.054$, $\sigma_{zz} < \sigma_{zz}^* \approx 6.3$ ГПа, $\sigma_d < 2.25$ ГПа происходит упру-

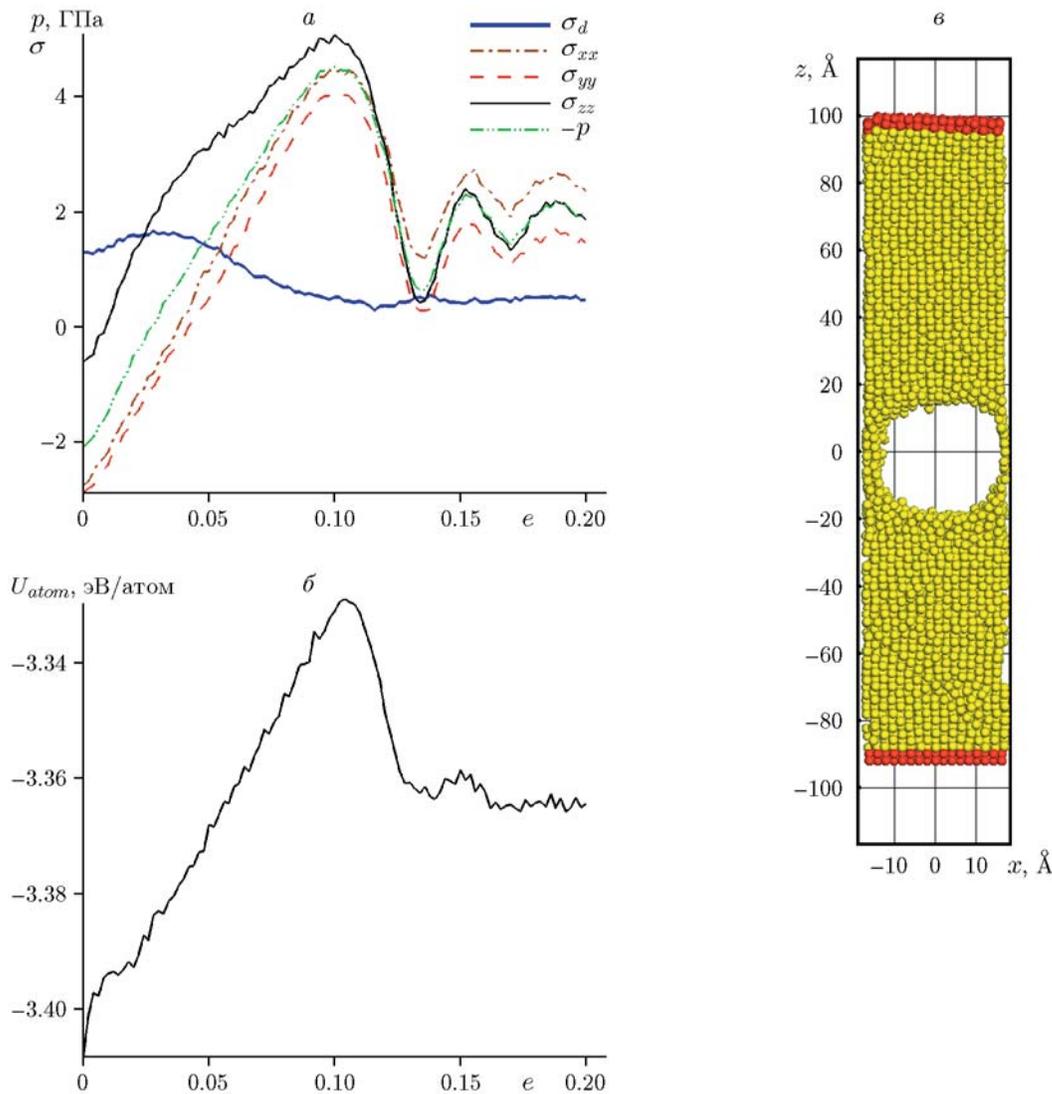


Рис. 10. Рассчитанные зависимости средних параметров в образце алюминия при $T = 650 \text{ К}$: a — компоненты тензора, второй инвариант девиатора напряжений и обратное давление; b — внутренняя энергия атома; c — атомная конфигурация при $e = 0.14$

гое растяжение образца. Напряжение вдоль оси растяжения является линейной функцией деформации $\Delta\sigma_{zz} = C_{33}e$, значение $C_{33} = \Delta\sigma_{zz}^*/e_* \approx 84.3 \text{ ГПа}$ получаем из рис. 9, a . Упругая энергия является квадратичной функцией деформации $U - U_0 = C_{33}e^2/2$. При $e > e_*$ в малой окрестности цилиндрической трещины развивается пластическая деформация. При критическом напряжении $\sigma_{zz}^* \approx 6.3 \text{ ГПа}$ под действием растягивающих напряжений происходит рост трещины, который сопровождается упругой разгрузкой в виде уменьшения напряжений и упругой энергии в образце. При выходе трещины на боковые границы образца он

разрушается путем разделения на две части (рис. 9, b). При разрушении запасенная упругая энергия вызывает упругие колебания образца, что приводит к осцилляциям упругой энергии, показанным на рис. 9, b . В данном случае при росте трещины пластическая деформация наблюдается в ее малой окрестности, поэтому при $T = 300 \text{ К}$ происходит хрупкое разрушение нанокристалла Al.

Представляет интерес сравнить полученное критическое напряжение разрушения с соответствующим значением, рассчитанным для Al в [8]. В этой работе методом МД моделировалось разрушение Al при одноосном растяже-

нии с помощью различных потенциалов [10–12] при нескольких значениях скорости деформации. На рис. 3, 13 в работе [8] показаны зависимости критического напряжения разрушения Al от скорости деформации $\sigma^* = \sigma^*(\dot{\epsilon})$ в диапазоне $10^8 \leq \dot{\epsilon} < 10^{11} \text{ с}^{-1}$. Из этих рисунков видно, что при $\dot{\epsilon} = 6.25 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ величина $\sigma^* \approx 6.0 \text{ ГПа}$, рассчитанная для потенциала [10], удовлетворительно согласуется с критическим напряжением разрушения $\sigma^* \approx 6.3 \text{ ГПа}$, полученным в данной работе. В работе [8] на рис. 3, 13 приведены также рассчитанные при $\dot{\epsilon} = 10^9 \text{ с}^{-1}$ значения σ^* в сравнении с данными эксперимента [3]. Для потенциала [10] при $\dot{\epsilon} = 10^9 \text{ с}^{-1}$ в работе [8] получено $\sigma^* \approx 5.9 \text{ ГПа}$, а для потенциала [11] — $\sigma^* \approx 6.4 \text{ ГПа}$. В пределах точности эксперимента оба значения σ^* совпадают с соответствующими экспериментальными точками [3]. Отсюда следует, что количественные результаты, полученные с помощью МД-моделирования и потенциалов [10, 11], имеют точность порядка $\delta\sigma^*/\sigma^* \approx \pm 0.05$.

Задача 6 о растяжении образца Al при температуре $T = 650 \text{ К}$ с периодическими граничными условиями. На рис. 10 приведены зависимости компонент тензора напряжений и внутренней энергии U_{atom} от деформации и атомная конфигурация в момент разрушения.

Из рис. 10,а следует, что при $T = 650 \text{ К}$ разрушение нанокристалла Al начинается при критическом напряжении $\sigma^* \approx 5.1 \text{ ГПа}$. При $e < 0.04$, $\sigma_{zz} < 2.7 \text{ ГПа}$ развивается упругая деформация, за исключением малой окрестности трещины. При $e > 0.04$ происходит пластическая деформация, которая сопровождается релаксацией касательных напряжений $\frac{d\sigma_d}{de} < 0$, однако плавление Al в этом случае не происходит ($\frac{d\sigma_{zz}}{de} > 0$). Внутренняя энергия является линейной функцией деформации $U_{atom}(e) \sim e$ (см. рис. 10,б). Рост трещины при $e > 0.11$ приводит к уменьшению напряжений $\frac{d\sigma_{zz}}{de} < 0$ и резкому уменьшению упругой энергии в образце. Упругая энергия расходуется на рост трещины, который заканчивается разрушением при выходе трещины на границы образца (рис. 10,в). В работе [8] на рис. 14 приведены рассчитанные методом МД зависимости критического напряжения разрушения от температуры $\sigma^*(T)$ при одноосном растяжении Al. Из кривой $\sigma^*(T)$ на этом рисунке, рассчитан-

ной с помощью потенциала [10] при $T = 650 \text{ К}$, находим $\sigma^* \approx 4 \text{ ГПа}$. Это несколько меньше значения $\sigma^* \approx 5.1 \text{ ГПа}$, полученного в данной работе с помощью того же потенциала [10] при $T = 650 \text{ К}$. Отличие, по-видимому, связано с тем, что результаты, приведенные на рис. 14 в [8], получены при скорости деформации $\dot{\epsilon} = 10^9 \text{ с}^{-1}$, а в данной работе — при большей скорости деформации $\dot{\epsilon} = 6.25 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено численное моделирование разрушения нанокристаллов Ti и Al при одноосном растяжении и различных температурах. При температуре $T = 300 \text{ К}$ основные закономерности разрушения этих нанокристаллов такие же, как для макроскопических образцов. При растяжении образцов сначала в них происходит упругая деформация, затем пластическая деформация, которая приводит к росту трещин и разрушению образцов. Расчеты разрушения нанокристаллов при температуре порядка $0.6 \div 0.7$ от температуры плавления ненапряженного нанокристалла показали, что мягкий и твердый образцы разрушаются по-разному. Мягкий нанокристалл Al разрушается так же, как и макроскопический кристалл: сначала упругая деформация, далее пластическая деформация, затем разрушение. При растяжении твердого нанокристалла Ti сначала происходит упругая деформация, затем плавление образца, после чего растягивается расплавленный образец. В расплавленном образце за счет тепловых флуктуаций возникают поры, рост которых приводит к разрушению образца. Данный эффект в твердых нанокристаллах возникает за счет уменьшения температуры плавления при растяжении, и обусловлен тем, что в них затруднена релаксация касательных напряжений за счет рождения и скольжения дислокаций. В этом случае релаксация касательных напряжений в них происходит при плавлении нанокристалла. В нанокристаллах процесс плавления облегчается наличием больших флуктуаций плотности и температуры. В макроскопических твердых образцах релаксация напряжений происходит за счет роста трещин (хрупкое разрушение), которые всегда присутствуют в макроскопических образцах.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Работнов Ю. Н.** Механика деформируемого твердого тела. — М.: Наука, 1979.
2. **Курран Д. Р.** Динамическое разрушение // Динамика удара: пер. с англ. / под ред. С. С. Григоряна / Зукас Дж. А., Николас Т., Свифт Х. Ф., Грещук Л. Б., Курран Д. Р. — М.: Мир, 1985. — С. 257–293.
3. **Ашитков С. И., Агранат М. Б., Канель Г. И., Комаров П. С., Фортгов В. Е.** Поведение алюминия вблизи предельной теоретической прочности в экспериментах с фемтосекундным лазерным воздействием // Письма в ЖЭТФ. — 2010. — Т. 29, вып. 8. — С. 568–573.
4. **Годунов С. К.** Моделирование ударно-волновых процессов в упругопластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях / С. К. Годунов, С. П. Киселев, И. М. Куликов, В. И. Мали. — Москва; Ижевск: Ин-т компьютерных исследований, 2014.
5. **Киселев С. П.** Метод молекулярной динамики в механике деформированного твердого тела // ПМТФ. — 2014. — Т. 55, № 3. — С. 113–139.
6. **Chang L., Zhou C.-Y., Wen L.-L., Jian L., He X.-H.** Molecular dynamics study of strain rate effects on tensile behavior of single crystal titanium nanowire // Comput. Mater. Sci. — 2017. — V. 128. — P. 348–358.
7. **Chang L., Zhou C.-Y., Liu H.-X., Li J., He X.-H.** Orientation and strain rate dependent tensile behavior of single crystal titanium nanowires by molecular dynamics simulations // J. Mater. Sci. Technol. — 2018. — V. 34. — P. 864–877.
8. **Pogorelko V. V., Mayer A. E.** Influence of titanium and magnesium nano-inclusion on the strength of aluminum at high-rate tension: Molecular dynamics simulations // Mater. Sci. Eng. A. — 2016. — V. 662. — P. 227–240.
9. **Mayer A. E., Mayer P. N.** Evolution of pore ensemble in solid and molten aluminum under dynamic tensile fracture: Molecular dynamics simulations and mechanical models // Int. J. Mech. Sci. — 2019. — V. 157–158. — P. 816–832.
10. **Zope R. R., Mishin Y.** Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al systems // Phys. Rev. B. — 2003. — V. 68. — 024102.
11. **Apostol F., Mishin Y.** Interatomic potential for the Al–Cu systems // Phys. Rev. B. — 2011. — V. 83. — 054116.
12. **Liu X.-Y., Ohotnicky P. P., Adams J. B., Lane Roher C., Hyland R. W.** Anisotropic surface segregation in Al–Mg alloys // Surf. Sci. — 1997. — V. 373, N 2–3. — P. 357–370.
13. **Plimpton S. J.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. — 1995. — V. 117. — P. 1–9.
14. **Жиляев П. А., Куксин А. Ю., Стегайлов В. В., Янилкин А. В.** Влияние пластической деформации на разрушение монокристалла алюминия при ударно-волновом нагружении // Физика твердого тела. — 2010. — Т. 52, вып. 8. — С. 1508–1512.
15. **Качанов Л. М.** Основы теории пластичности. — М.: Наука, 1969.
16. **Kuksin A. Yu., Norman G. T., Stegailov V. V., Yanilkin A. V.** Theory and molecular dynamics modeling of spall fracture in liquids // Phys. Rev. B. — 2010. — V. 82. — 174101.
17. **Kiselev S. P., Zhirov E. V.** Molecular-dynamics simulation of the synthesis of intermetallic Ti–Al // Intermetallics. — 2014. — V. 49. — P. 106–114. — <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2014.01.008>.
18. **Киселев С. П.** Численное моделирование разрушения нанокристалла интерметаллида Ti–Al методом молекулярной динамики // Докл. АН. — 2018. — Т. 483, № 6. — С. 616–619.
19. **Nose S. J.** Unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods // Chem. Phys. — 1984. — V. 81. — P. 511–519.
20. **Ogata S., Li J., Hirotsuki N., Shibutani Y., Yip S.** Ideal shear strain of metals and ceramics // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 70. — 104104.
21. **Ашитков С. И., Комаров П. С., Струлева Е. В., Агранат М. Б.** Сопrotивление деформированию титана вблизи теоретического предела прочности // Теплофизика высоких температур. — 2018. — Т. 56. — С. 897–901.
22. **De Ressequier T., Signor L., Dragon A., Severin P., Boustie M.** Spallation in laser shock — loaded tin below and just above melting // J. Appl. Phys. — 2007. — V. 102. — 073535.
23. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теория упругости. — М.: Наука, 1987.
24. **Handbook of physical quantities** / I. S. Grigoriev, E. Z. Meilikhov (Eds). — Boca Ration: CRC Press, 1997.
25. **Ackland G.** Theoretical study of titanium surfaces and defects with a new many-body potential // Phil. Mag. A. — 1992. — V. 66, N 6. — P. 917–932.

Поступила в редакцию 25.06.2020.

После доработки 08.10.2020.

Принята к публикации 28.10.2020.