

УДК 539.22

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ РАЗРУШЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА $TiAl_3$

С. П. Киселев

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

Представлены результаты численного моделирования методом молекулярной динамики разрушения нанокристаллов интерметаллида $TiAl_3$ при одноосном растяжении в широком диапазоне температур ($300 \div 1200$ К). Показано, что при растяжении нанокристаллов интерметаллидов $TiAl_3$, нагретых до температуры порядка 1000 К, сначала происходит фазовый переход из кристаллического состояния в жидкое, а затем их разрушение. Разрушению нагретой нанопроволоки из $TiAl_3$ предшествует деформация в режиме сверхпластичности.

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

DOI: 10.15372/PMTF20210307

Введение. Исследованию деформации и разрушения нанокристаллов при динамических нагрузках методом молекулярной динамики (МД) посвящено большое количество работ. Отметим работы [1–8], в которых методом МД моделировались разрушение и деформация нанокристаллов титана Ti и алюминия Al. Основные принципы моделирования деформации и разрушения нанокристаллов методом МД изложены, например, в [9, 10]. Разрушение нанокристалла представляет собой сложный многостадийный процесс, происходящий при нагружении образца. В отличие от разрушения макроскопических образцов [11] разрушение нанокристаллов происходит при значительно более высоких скоростях деформации (10^{10} с^{-1} и более). Поскольку в настоящее время имеются только отдельные экспериментальные данные о разрушении при указанных скоростях деформации [12, 13], при исследовании процессов разрушения нанокристаллов используется метод МД. В работе [14] методом МД изучалось разрушение нанокристалла $TiAl_3$ при различных значениях температуры в случае одноосного деформирования при растяжении образцов. Обнаружено, что при растяжении интерметаллида $TiAl_3$, нагретого до температуры $T \geq 1000$ К, перед разрушением происходит фазовый переход в жидкое состояние, а затем вязкое разрушение расплава. В данной работе представлены результаты моделирования методом МД разрушения интерметаллидов $TiAl_3$ при температурах 300 и 1000 К в случае одноосной деформации и одноосного напряжения при растяжении образцов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 19-01-00292).

© Киселев С. П., 2021

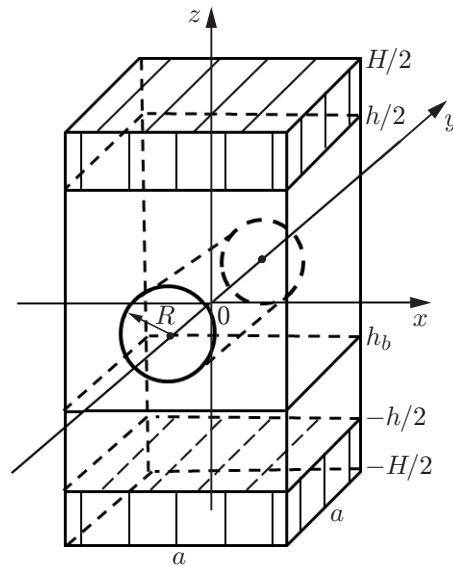


Рис. 1. Образец интерметаллида до растяжения

1. Постановка задачи. Численное моделирование процесса приготовления образцов интерметаллидов и их разрушения проводилось методом МД, в котором для численного расчета траекторий движения атомов Ti и Al использовался пакет LAMMPS [15], взаимодействие атомов Ti и Al описывалось многочастичным EAM-потенциалом (EAM — embedded atom method (метод погруженного атома)) [16].

Подготовка образца интерметаллида TiAl_3 (рис. 1) включала два этапа. На первом этапе готовился образец, состоящий из нанокристаллов Ti и Al. В слое нанокристаллов $-H/2 < z < h_b$ размещались атомы Ti в узлах идеальной гексагональной плотноупакованной решетки. В слое $h_b < z < H/2$ размещались атомы Al в узлах идеальной гранцентрированной кубической решетки. Величина h_b подбиралась таким образом, чтобы в образце композита соотношение числа атомов Ti и Al составляло 1 : 3. На втором этапе моделировался нагрев образца композита, состоящего из нанокристаллов Ti и Al, до температуры T_0 , превышающей температуру плавления Al. В этом случае происходило растворение Ti в расплаве Al и образование интерметаллида TiAl_3 в расплавленном состоянии. Затем моделировалось охлаждение расплава до температуры, при которой в образце происходила кристаллизация, в результате чего возникал нанокристалл интерметаллида TiAl_3 [17]. В приготовленном образце нанокристалла TiAl_3 вырезалось цилиндрическое отверстие радиусом R , ось которого была направлена вдоль оси y . Данное отверстие моделировало цилиндрическую трещину, что позволяло локализовать разрушение в середине образца. Затем моделировались нагрев образца до заданной температуры T и растяжение при заданной температуре вдоль оси z до разрушения образца. Моделирование нагрева образца проводилось с помощью NVT-алгоритма [18]. При нагреве атомы, находящиеся в нижнем слое ($-H/2 < z < -h/2$), были зафиксированы, а верхняя граница образца свободна от напряжений. На боковых границах образца ставились условия периодичности.

При моделировании растяжения образца интерметаллида вдоль оси z атомам, находящимся в слоях $-H/2 < z < -h/2$, $h/2 < z < H/2$ (см. рис. 1), сообщалась постоянная скорость $\mp v_0$. Рассматривались два случая растяжения образца. В первом случае при растяжении на боковых границах образца ($x = \pm a/2$, $y = \pm a/2$) ставились условия периодичности. Этот случай одноосного деформирования реализуется при разрушении пластины после выхода ударной волны на ее свободную поверхность [12, 13]. Во втором случае при

растяжении образца его боковые границы были свободны от напряжений. В этом случае в образце имеет место одноосно-напряженное состояние, которое возникает при растяжении нанопроволоки.

В образце в каждый момент времени методом МД рассчитывались координаты x_{ai} и скорости v_{ai} атомов, с использованием которых методом осреднения по объему определялись макроскопические параметры в образце. По формулам, приведенным в [9, 10], вычислялись температура T , средние напряжения σ_{ij} , давление $P = -\sigma_{ii}/3$ и второй инвариант девиатора тензора напряжений

$$\sigma_d = \sqrt{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{yy})^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2)} / \sqrt{6}.$$

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

$$U = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U_i,$$

где U_i — потенциальная энергия i -го атома; N — число атомов в образце.

Численные расчеты проводились при следующих геометрических размерах образцов: $a = 34 \text{ \AA}$, $H = 160 \text{ \AA}$, $h = 152 \text{ \AA}$, радиус отверстия равен $R = 4 \text{ \AA}$. Полуширина слоя осреднения радиальной функции составляла $\Delta = 4 \text{ \AA}$. Растяжение образца проводилось со скоростью $v_0 = 0,5 \text{ \AA/пс}$. Деформация e вдоль оси z определялась по формуле $e = \dot{\epsilon}_z t$, где $\dot{\epsilon}_z = 2v_0/H = 6,25 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ — скорость деформации; t — время, в течение которого происходит растяжение образца.

2. Обсуждение результатов расчетов. Ниже приведены результаты численного моделирования разрушения нанокристалла интерметаллида TiAl_3 . Были решены четыре задачи. В задаче 1 растяжение осуществлялось при температуре $T = 300 \text{ К}$, на боковых границах задавались периодические граничные условия. В задаче 2 растяжение выполнялось при температуре $T = 1000 \text{ К}$, на боковых границах также задавались периодические граничные условия. В задаче 3 растяжение проводилось при температуре $T = 300 \text{ К}$, боковые границы были свободны от напряжений. В задаче 4 растяжение осуществлялось при температуре $T = 1200 \text{ К}$, боковые границы были также свободны от напряжений.

2.1. *Растяжение нанокристалла TiAl_3 в случае периодических условий на боковых границах.* На рис. 2, 3 приведены результаты решения задач 1, 2 при одноосном растяжении образцов TiAl_3 . На рис. 2,а показаны атомные конфигурации в образце TiAl_3 до начала растяжения (в начальный момент времени $e = 0$, $T = 300 \text{ К}$) и в момент разрушения t_* ($e_* = \dot{\epsilon}_z t_*$) при $T = 300 \text{ К}$ (см. рис. 2,б) и $T = 1000 \text{ К}$ (см. рис. 2,в). На рис. 3 приведены зависимости от деформации e компонент σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} тензора напряжений, второго инварианта девиатора тензора напряжений σ_d , давления $-P$ и средней внутренней энергии U , приходящейся на один атом, при одноосном растяжении образцов TiAl_3 . На рис. 3,а,б показаны зависимости, полученные при $T = 300 \text{ К}$, на рис. 3,в,г — при $T = 1000 \text{ К}$.

Задача 1 ($T = 300 \text{ К}$). Из рис. 2, 3 следует, что при температуре $T = 300 \text{ К}$ имеет место хрупкое разрушение образца. При деформации $e < e_e = 0,06$ происходит его упругое деформирование. Напряжение является линейной функцией деформации $\sigma_{zz} = C_{11}e$ (см. рис. 3,а), а внутренняя энергия — квадратичной функцией деформации $\tilde{U} - \tilde{U}_0 = C_{11}e^2/2$ (см. рис. 3,б). С использованием рис. 3,а находим значение модуля упругости нанокристалла интерметаллида TiAl_3 $C_{11} = \sigma_{zz}/e \approx 155 \text{ ГПа}$, при этом максимальное растягивающее напряжение $\sigma_{zz}^* \approx 9,3 \text{ ГПа}$. При $e < e_e$ растяжение образца происходит упруго, а при дальнейшем растяжении ($e > e_e$) начинается рост трещины, обусловленный наличием упругой

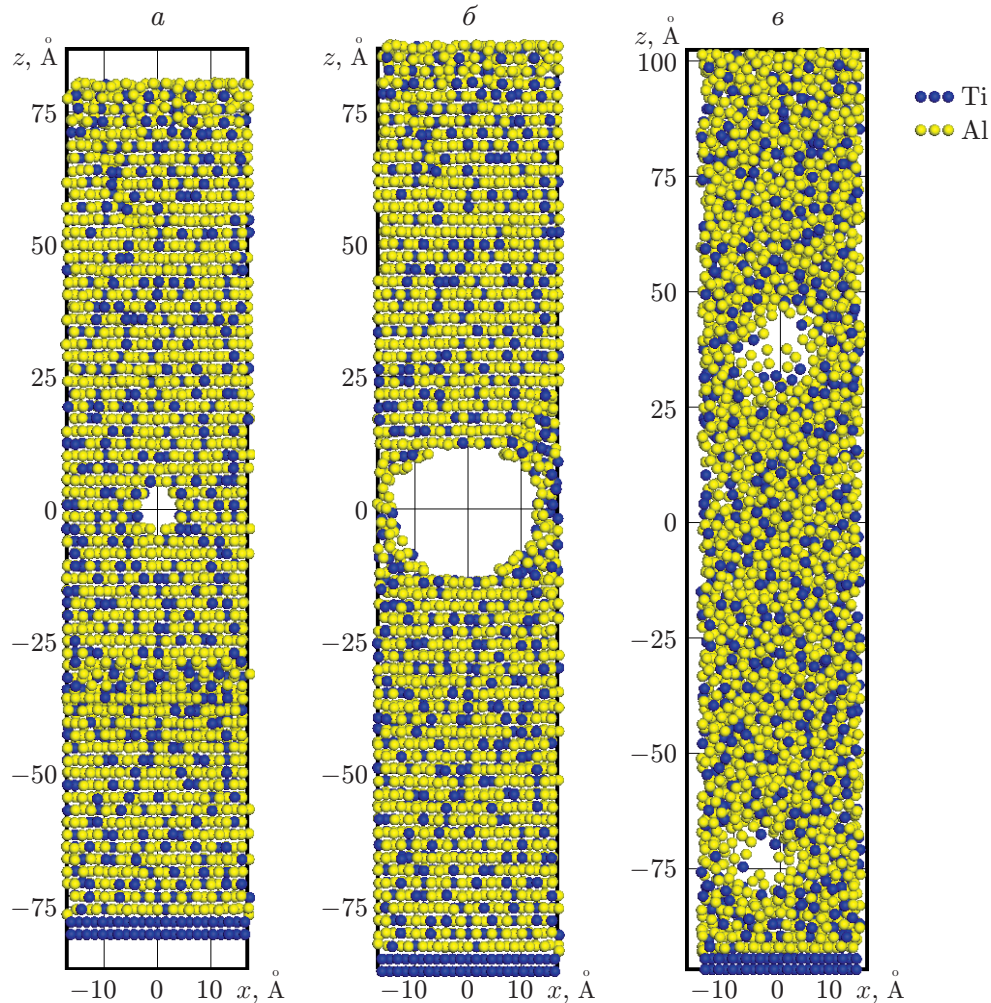


Рис. 2. Атомные конфигурации в слое $-4 \text{ \AA} < y < 4 \text{ \AA}$ нанокристалла TiAl_3 в случае периодических условий на боковых границах:
 а — $e = 0$ ($T = 300 \text{ K}$), б — $e_* = 0,1$ ($T = 300 \text{ K}$), в — $e_* = 0,16$ ($T = 1000 \text{ K}$)

энергии, при этом происходит упругая разгрузка (см. рис. 3,а,б). При выходе трещины на боковые границы образца происходит его разрушение путем разделения на две части (см. рис. 2,б). При разрушении оставшаяся часть упругой энергии вызывает упругие колебания в образовавшихся образцах (см. рис. 3,а,б). Таким образом, при температуре $T = 300 \text{ K}$ происходит хрупкое разрушение нанокристалла TiAl_3 , которое начинается при напряжении $\sigma_{zz}^* \approx 9,3 \text{ ГПа}$. Небольшие пластические деформации происходят только в малой окрестности трещины.

Задача 2 ($T = 1000 \text{ K}$). При температуре $T = 1000 \text{ K}$ происходит вязкое разрушение нанокристалла TiAl_3 (см. рис. 2,в, 3,в,г). Из рис. 2,в, 3,в,г следует, что в нанокристалле TiAl_3 при $e < 0,05$, $\sigma_{zz} < 5,4 \text{ ГПа}$ происходит упругое деформирование. Напряжение прямо пропорционально деформации $\sigma_{zz} = C'_{11}e$, при этом “эффективный модуль упругости” уменьшается и равен $C'_{11} = \sigma_{zz}/e \approx 108 \text{ ГПа}$. В интервале $0,05 < e < 0,08$ зависимость $\sigma_{zz} = \sigma_{zz}(e)$ становится немонотонной и содержит участок $0,06 < e < 0,07$, на котором происходит разупрочнение материала $d\sigma_{zz}/de < 0$ (см. рис. 3,в). Немонотонная зависимость $\sigma_{zz} = \sigma_{zz}(e)$ свидетельствует о фазовом превращении, которое происходит в образце на участке деформирования $0,05 < e < 0,08$. На рис. 3,в приведена зависимость второго ин-

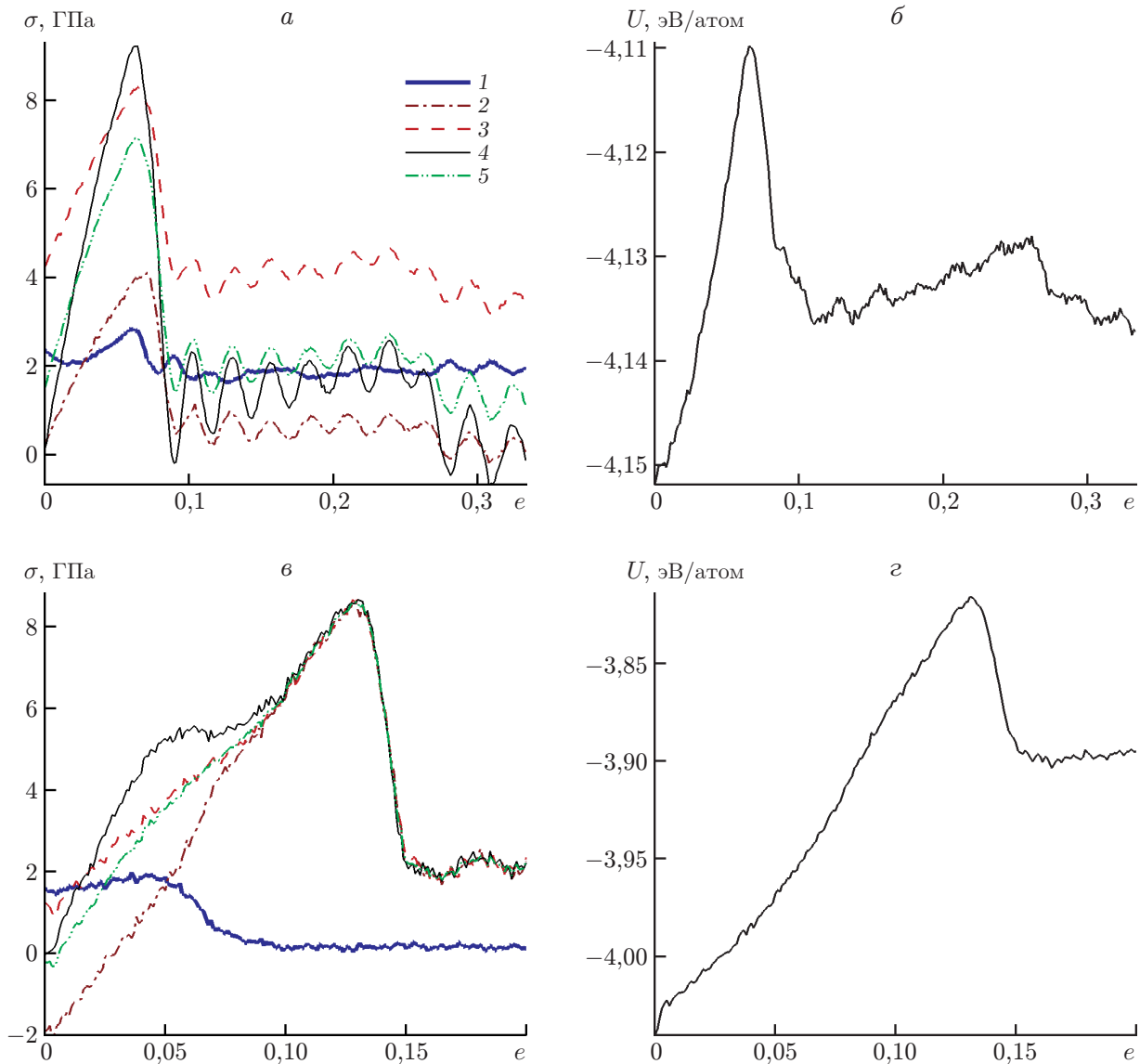


Рис. 3. Зависимости средних значений параметров σ_d (1), σ_{xx} (2), σ_{yy} (3), σ_{zz} (4), $-P$ (5) (а, б) и U (б, з) в образце от деформации e при различных значениях температуры:

а, б — $T = 300$ К, в, з — $T = 1000$ К

варианта тензора напряжений от деформации $\sigma_d = \sigma_d(e)$. Видно, что при $0,05 < e < 0,08$ второй инвариант тензора напряжений обращается в нуль: $\sigma_d = 0$. Следовательно, при растяжении образца в интервале $0,05 < e < 0,08$ происходит плавление нанокристалла TiAl_3 , что приводит к появлению излома на кривой зависимости $U(e)$ при $e = 0,08$ (см. рис. 3,з). После фазового перехода образец TiAl_3 имеет аморфную атомную структуру. При дальнейшем растяжении образца ($e > 0,08$) все компоненты тензора напряжений увеличиваются по линейному закону и равны между собой: $\sigma_{zz} = \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = -P = Ke$. В растягиваемом образце происходят флуктуации плотности, в результате чего возникают сферические поры. При некотором критическом напряжении $\sigma_{zz}^* \approx 8,7$ ГПа начинается рост сферических пор, что приводит при $e > 0,13$ к разупрочнению материала ($d\sigma_{zz}/de < 0$) и его разделению на части (см. рис. 2,в). Следовательно, при $\sigma_{zz}^* \approx 8,7$ ГПа

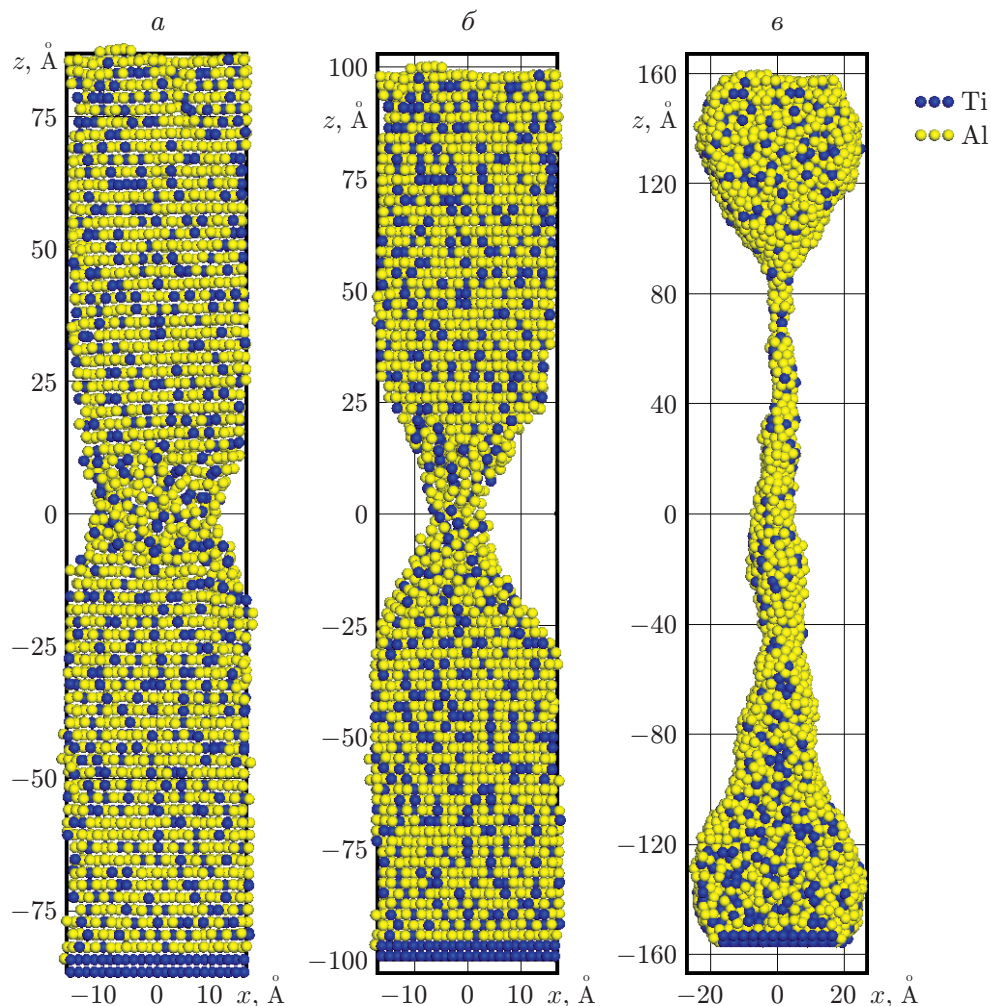


Рис. 4. Атомные конфигурации в слое $-4 \text{ \AA} < y < 4 \text{ \AA}$ нанокристалла TiAl_3 в случае свободных боковых границ:
 а — $e = 0,09$ ($T = 300 \text{ К}$), б — $e = 0,3$ ($T = 300 \text{ К}$), в — $e_* \approx 0,98$ ($T = 1200 \text{ К}$)

происходит вязкое разрушение расплавленного образца TiAl_3 . Сначала за счет плавления происходит релаксация касательных напряжений, а затем за счет роста пор — релаксация давления.

2.2. *Растяжение нанокристалла TiAl_3 в случае свободных боковых границ.* На рис. 4, 5 приведены результаты решения задач 3 и 4 при растяжении образцов TiAl_3 , боковые границы которых были свободны от напряжений.

Задача 3 ($T = 300 \text{ К}$). На рис. 4, а, б показаны атомные конфигурации, возникающие в идеальном нанокристалле TiAl_3 при значениях деформации $e = 0,09; 0,30$. На рис. 5, а, б представлены зависимости тензора напряжения и упругой энергии от деформации. Видно, что в нанокристалле TiAl_3 реализуется одноосно-напряженное состояние: $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0$. При растяжении образца сначала в нем происходит упругая деформация, при которой напряжение σ_{zz} линейно зависит от деформации (см. рис. 5, а). Затем трещина закрывается, и при деформации $e = 0,09$ образуется шейка. Это приводит к разупрочнению материала, при котором напряжение σ_{zz} в образце уменьшается до нуля. При дальнейшем растяжении образца шейка утончается (см. рис. 4, а, б) до тех пор, пока не происходят нарушение сплошности и разрушение образца на две части. Приходящаяся на один атом средняя внутренняя

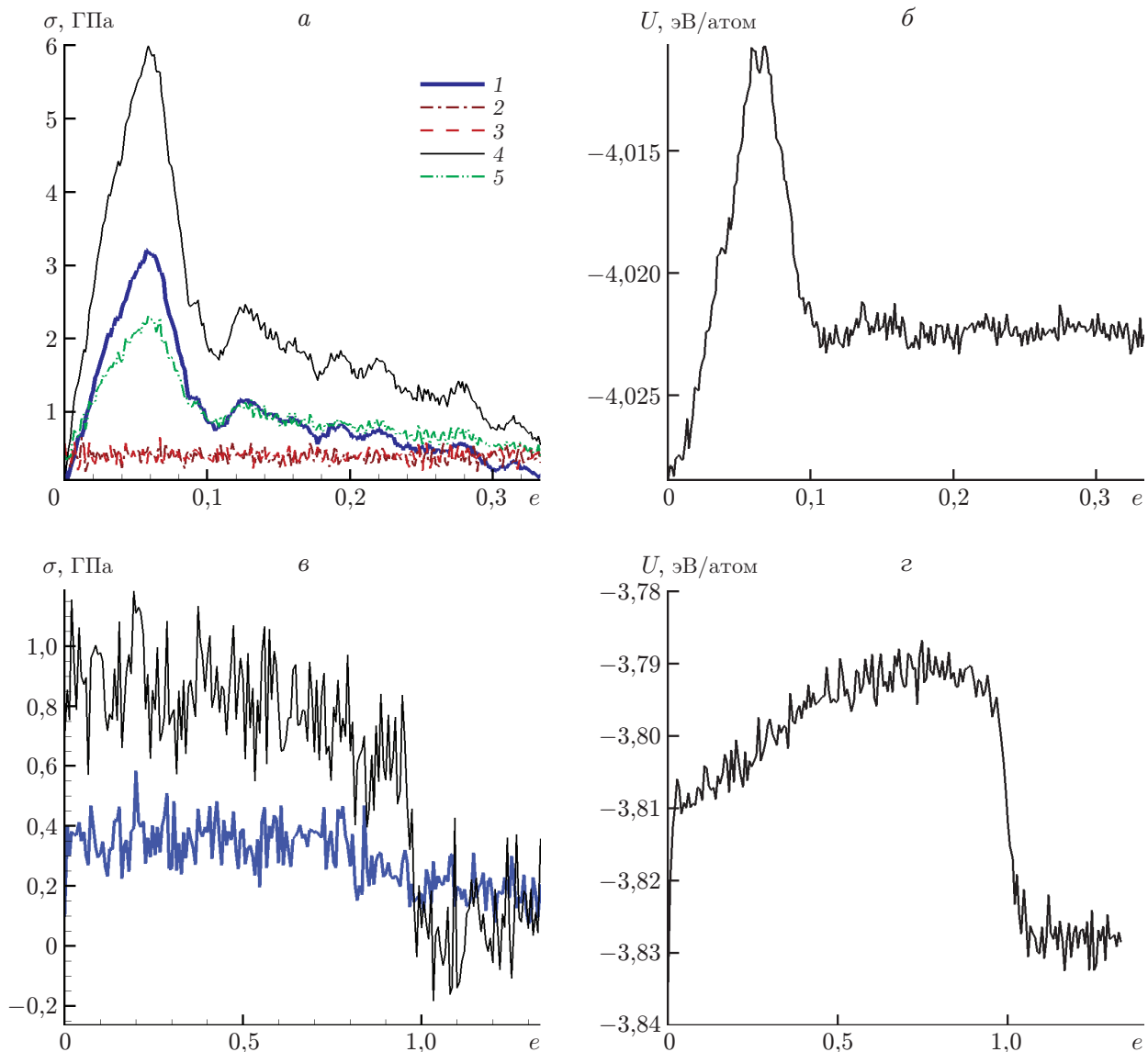


Рис. 5. Зависимости средних значений параметров σ_d (1), σ_{xx} (2), σ_{yy} (3), σ_{zz} (4), $-P$ (5) (а, в) и U (б, г) в образце от деформации e при различных значениях температуры:

а, б — $T = 300$ К, в, г — $T = 1200$ К

энергия $U(e)$ сначала увеличивается с ростом деформации e и достигает максимального значения в момент образования шейки (см. рис. 5,б). После образования шейки величина U резко уменьшается до некоторого значения U' , которое затем практически не меняется с увеличением деформации. Отметим, что при $e \rightarrow 0,3$ все компоненты тензора напряжений стремятся к нулю: $\sigma_{ij} \rightarrow 0$, тем не менее величина U' больше, чем $U(0)$ в начальном недеформированном состоянии ($e = 0$). Это обусловлено тем, что после разрушения образца часть энергии запасается в атомной решетке, искаженной вследствие пластической деформации в области шейки. Во всем образце, за исключением области шейки, деформация была упругой, поэтому при температуре $T = 300$ К происходит хрупкое разрушение нанокристалла TiAl_3 в результате образования шейки.

Задача 4 ($T = 1200$ К). При растяжении нанокристалла TiAl_3 , нагретого до температуры $T = 1200$ К, практически мгновенно происходит его переход в аморфное состояние. При дальнейшем растяжении образца возникает шейка, которая утончается, что приводит к разрыву образца на две части. На рис. 4,в приведена атомная конфигурация, возникающая в образце TiAl_3 в момент разрушения при деформации $e_* \approx 0,98$. На рис. 5,в,г показаны зависимости σ_d , σ_{zz} и упругой энергии U от деформации. Из рис. 5,в,г следует, что при растяжении напряжения остаются практически постоянными, а упругая энергия медленно увеличивается, что обусловлено, по-видимому, увеличением числа дефектов в образце. При растяжении напряжения и энергия испытывают значительные пульсации, вызванные флуктуациями атомов в аморфном состоянии. Описанная картина растяжения наблюдается в макроскопических образцах, которые деформируются в условиях сверхпластичности. Видно, что в нагретом образце TiAl_3 наблюдается явление, аналогичное сверхпластичности, при котором деформация разрушения увеличивается в три раза по сравнению с холодным ($T = 300$ К) образцом.

Заключение. Методом МД с использованием многочастичного потенциала исследовано разрушение нанокристаллов интерметаллида TiAl_3 при значениях температуры $T = 300, 1000, 1200$ К при одноосном растяжении. Показано, что при $T = 300$ К происходит хрупкое разрушение нанокристалла TiAl_3 , при $T = 1000, 1200$ К — вязкое разрушение нанокристалла TiAl_3 , имеющее две стадии. Первая стадия, на которой происходит упругое деформирование нанокристалла, заканчивается его плавлением. На второй стадии расплавленный образец растягивается, а затем разрушается. Отметим, что процесс двухстадийного разрушения, сопровождающийся плавлением, имел место также при моделировании растяжения нагретого нанокристалла титана Ti методом МД [19]. При моделировании растяжения нагретого нанокристалла алюминия Al методом МД данный процесс не наблюдался. При растяжении нанокристалла Al релаксация касательных напряжений происходила за счет пластической деформации, а релаксация давления — за счет роста трещины [19]. По-видимому, процесс релаксации касательных напряжений за счет плавления может происходить при разрушении хрупких нанокристаллов, в которых затруднены процессы образования и скольжения дислокаций.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Henza B. J., Hawa T., Zachariah M.** Molecular dynamics simulation of the kinetic sintering of Ni and Al nanoparticle // *Molecular Simulat.* 2009. V. 35, N 10/11. P. 804–811.
2. **Chang L., Zhou C.-Y., Wen L.-L., et al.** Molecular dynamics study of strain rate effects on tensile behavior of single crystal titanium nanowire // *Comput. Materials Sci.* 2017. V. 128. P. 348–358.
3. **Chang L., Zhou C.-Y., Liu H.-X., et al.** Orientation and strain rate dependent tensile behavior of single crystal titanium nanowires by molecular dynamics simulations // *J. Materials Sci. Technol.* 2018. V. 34. P. 864–877.
4. **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 // *Materials Sci. Engng. A.* 2016. V. 662. P. 227–240.
5. **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 // *Intern. J. Mech. Sci.* 2019. V. 157/158. P. 816–832.
6. **Hui C., Zhiyuan R., Wence C., et al.** Deformation mechanisms in nanotwinned γ -TiAl by molecular dynamics simulation // *Molecular Simulat.* 2018. V. 44, N 18. P. 1489–1500.

7. **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.
8. **Kiselev S. P., Zhirov E. V.** Molecular-dynamics simulation of the synthesis of intermetallic Ti–Al // Intermetallics. 2014. V. 49. P. 106–114.
9. **Киселев С. П.** Метод молекулярной динамики в механике деформированного твердого тела // ПМТФ. 2014. Т. 55, № 3. С. 113–139.
10. **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. М.; Ижевск: Ин-т компьютер. исслед., 2014.
11. **Курран Д. Р.** Динамическое разрушение // Динамика удара. М.: Мир, 1985. С. 257–293.
12. **Ашитков С. И., Агранат М. Б., Канель Г. И. и др.** Поведение алюминия вблизи предельной теоретической прочности в экспериментах с фемтосекундным лазерным воздействием // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 29, вып. 8. С. 568–573.
13. **Ашитков С. И., Комаров П. С., Струлева Е. В., Агранат М. Б.** Сопротивление деформированию титана вблизи теоретического предела прочности // Теплофизика высоких температур. 2018. Т. 56. С. 897–901.
14. **Киселев С. П.** Численное моделирование разрушения нанокристалла интерметаллида Ti–Al методом молекулярной динамики // Докл. АН. 2018. Т. 483, № 6. С. 616–619.
15. **Plimpton S. J.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. P. 1–9.
16. **Zope R. R., Mishin Y.** Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al systems // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 024102-1–024102-14.
17. **Киселев С. П.** Моделирование кристаллизации наночастицы Ti–Al методом молекулярной динамики // Докл. АН. 2016. Т. 466, № 4. С. 406–408.
18. **Nose S. J.** Unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods // Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 511–519.
19. **Киселев С. П., Киселев В. П.** Численное моделирование разрушения нанокристаллов титана и алюминия методом молекулярной динамики // Физика горения и взрыва. 2021. Т. 57, № 4.

*Поступила в редакцию 1/II 2021 г.,
после доработки — 1/II 2021 г.
Принята к публикации 1/III 2021 г.*
