

УДК 620

Л.М. Мурзин, доцент, канд. техн. наук,**С.А. Чубов***Севастопольский национальный технический университет
ул. Университетская, 33, г. Севастополь, Украина, 99053
mutzin60@rambler.ru***В.В. Огородников, ст. науч. сотр., канд. техн. наук***Институт проблем материаловедения НАН Украины
ул. Кржижановского, 3, г. Киев, Украина, 03680
ogorodnikov@voliacable.com***ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИИ НАНООБЪЕКТОВ**

В настоящей работе представлены результаты исследования деформации нанобалки из молибдена, выполненные методами компьютерного моделирования. Изучены состояния в процессе деформации изгибом комплекса атомов в форме призматического тела размерами сечения 5×5 атомов и длиной 31 атом. Зафиксированы атомно-структурные перестройки нанобъекта на этапах от начала деформации до разрушения.

Ключевые слова: нанобалка, изгиб, деформация, атомно-структурная перестройка, компьютерное моделирование.

Нанотехнологии развиваются весьма интенсивно в различных аспектах. Наибольший интерес вызывают научные основы структурообразования нанообъектов – материалов нового поколения. Однако вопросам деформирования, экспериментальному изучению особенностей деформации и напряженных состояний нанообъектов уделяется недостаточное внимание. Это связано с невозможностью проведения исследований деформации реальных тел нанометрового масштаба. Возможности современных испытательных приборов на базе туннельных микроскопов ограничены микрометровым масштабом исследуемых объектов, что на 3–4 порядка превышает критерий 100 нм, который принято считать размерным признаком нанометровых объектов. Поэтому изучение деформации нанообъектов с размерами порядка 100 нм может быть выполнено только средствами компьютерного моделирования в режиме так называемого «виртуального эксперимента».

Компьютерное моделирование процесса деформации нанообъекта (нанобалки из молибдена) в настоящей работе выполнено с помощью вычислительной процедуры в рамках метода молекулярной динамики. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики основаны на классической механике. Частицы рассматриваются как материальные точки, взаимодействующие через силовые поля, которые, в свою очередь, определяются потенциалами межатомного взаимодействия. Молекулярная динамика основана на численном решении ньютоновских уравнений движения для большого ансамбля частиц. Расчет дает траектории движения всех частиц и описывает эволюцию системы в течение определенного числа временных шагов, причем на каждом шаге доступна полная информация, как о каждой частице, так и о системе в целом. Все характеристики системы непосредственно связаны с микропараметрами, например, температура определяется как мера усредненной кинетической энергии частиц [1].

Поскольку реальные эксперименты чаще всего сложны, требуют длительного времени и потому весьма дороги, разумнее моделировать подобные экспериментальные исследования. Более того, возникает возможность проверять идеи или проводить гипотетические эксперименты, которые пока не удастся провести реально, но которые станут возможными в недалеком будущем. Расчеты методом молекулярной динамики требуют построения более или менее сложных моделей, зависящих от конкретной изучаемой системы. Первым шагом при использовании модели является задание положения и скорости для каждого атома.

Самостоятельной задачей, не требующей мультимасштабных моделей, является моделирование деформации и разрушения нанокристаллов. В этих экспериментах важны детали атомной динамики в нанообъекте и влияние внешних границ. Такие исследования проведены в серии работ В.В. Огородникова, К.В. Малишевского и др. [2, 3].

В указанных работах основное внимание уделено изучению деформации нанообъектов при одноосном линейном и всестороннем гидростатическом растяжении. В некоторых работах исследованы более сложные деформации, например деформация клином [4].

Однако эффекты, возникающие в нанообъектах при деформации изгибом по классической схеме, принятой в макроскопических испытаниях, не изучены. Деформация изгибом является одним из наиболее типичных сложных видов деформации, определяющих поведение реальных тел при различных условиях эксплуатации. Это имеет место и в случае применения нанокристаллов и наноструктурных материалов.

В настоящей работе поставлена **цель**: изучить особенности деформации атомной структуры нанообъекта вплоть до разрушения при различных температурах и сравнить полученные результаты с известными эффектами деформации макрообъектов. Особый интерес вызывает проблема применимости методов молекулярной динамики для исследования развитых степеней деформации, какие характерны для

стадії, предшествуючої руйнуванню матеріала. Питання про те, являється чи описання деформаційних ефектів поведінки наноб'єкта в віртуальному експерименті адекватним відомим фізичним моделям поведінки матеріала в зоні руйнування, залишається поки відкритим.

Комп'ютерне моделювання деформації нанобалки з молибдену виконано з допомогою програмного забезпечення Visual Basic. Нанобалка представляє собою атомний комплекс, що складається з 1255 атомів, а саме – призматичне тіло, що має переріз 5×5 атомів і довжину 31 атом. По кінцях балки мають опори, які не зміщуються в процесі деформації. Посередині балки знаходиться навантажувальне пристрій (умовно – ніж), який повідомляє задане переміщення первинним атомам. Переміщення первинних атомів відбувається з заданою швидкістю, рівною 10^{-12} м/фс. Атомно-структурні перестройки комплексу атомів нанобалки розраховуються на кожній ітерації, і є можливість візуального аналізу змін безпосередньо в ході деформації. Після 100 ітерацій, тривалістю 10 фемтосекунд, структурні зміни автоматично заносяться в пам'ять комп'ютера для аналізу змін по закінченні експерименту. В програмі передбачена можливість проведення деформації при різних температурах. Температура T задається введенням в початок експерименту випадкових швидкостей для атомів таким чином, щоб середнестатистична швидкість відповідала термодинамічному співвідношенню $W = 3/2 kT$, де W – середня кінетична енергія на атом. Отримані зображення атомно-структурних станів на визначених етапах деформування нанобалки були складені в вигляд послідовних фрагментів анімації з допомогою програми Windows Movie Maker. Такий прийом представлення результатів дослідження дозволяє спостерігати в реальному часі перетворення в атомній структурі наноб'єкта і виявляти особливості змін механізмів деформації в різних зонах досліджуваного тіла. В ході експериментів проведено деформування вигином нанобалки при температурах 300 К, 1000 К, 2800 К.

Розглянемо результати деформування вигином нанобалки з молибдену при різних температурах. При температурі деформації 300 К до моменту руйнування виконано 40000 ітерацій зсувів атомів під ніжом. Виділені стадії експерименту з характерними атомно-структурними станами. На рисунку 1 показані атомно-структурні перестройки, що відбуваються в нанобалці.

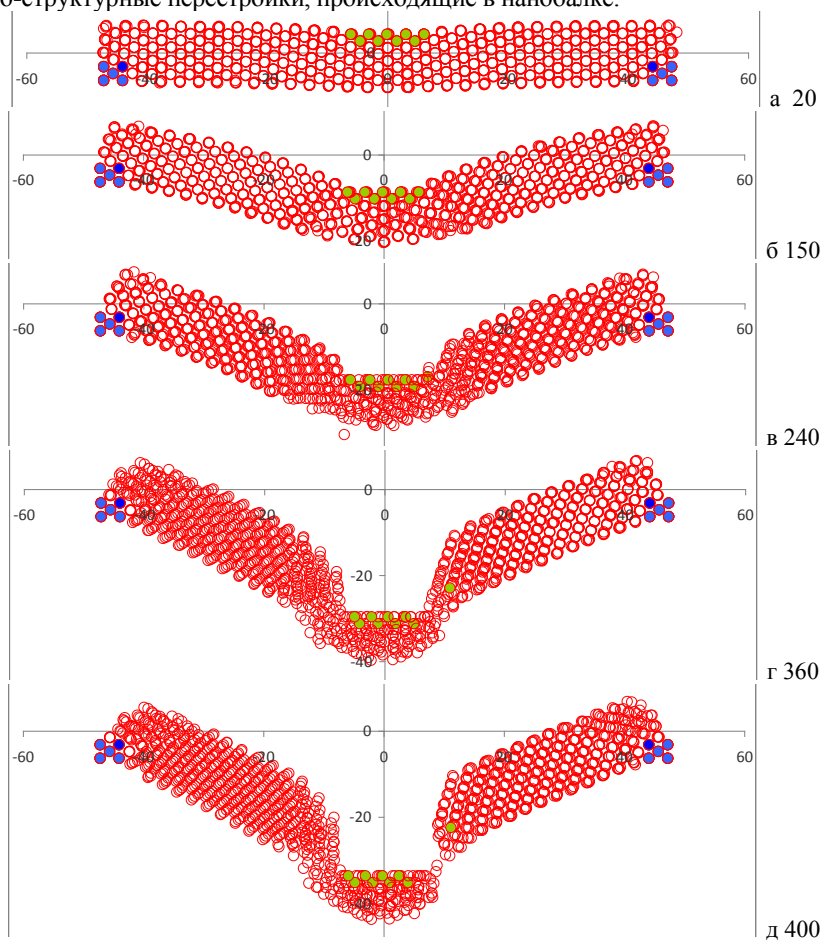


Рисунок 1 – Атомно-структурні перестройки при деформації вигином нанобалки з молибдену при температурі 300 К. Число ітерацій $\times 100$: а – 20; б – 150; в – 240; г – 360; д – 400

На початковій стадії деформування (рисунк 1, стадія а) атоми під ніжом переміщуються вниз, викликаючи еластичні зміщення решітчастих атомів нанобалки. Після 15000 ітерацій (стадія б) в зонах,

прилегающих к ножу, возникают хаотические смещения атомов, характерные для вязкого течения материала. В зонах нанобалки, расположенных между ножом и опорами, имеет место упругий противоизгиб, кривизна которого обращена в сторону, противоположную направлению смещения первичных атомов под ножом. При дальнейшей деформации зоны хаотических смещений атомов распространяются в стороны от ножа (стадия в). Развитие процесса вязкого течения материала нанобалки при 24000 итераций приводит к образованию под ножом зоны глубокого выдавливания. После 36000 итераций образуется шейка с правой стороны ножа (стадия г) и при 40000 итераций происходит отрыв атомов с правой стороны ножа (стадия д).

При температуре деформации 1000 К до момента разрушения выполнено 45000 итераций смещений атомов под ножом. Выделены стадии эксперимента с характерными атомно-структурными состояниями. На рисунке 2 показана анимация атомно-структурных перестроек, полученных в данном опыте.

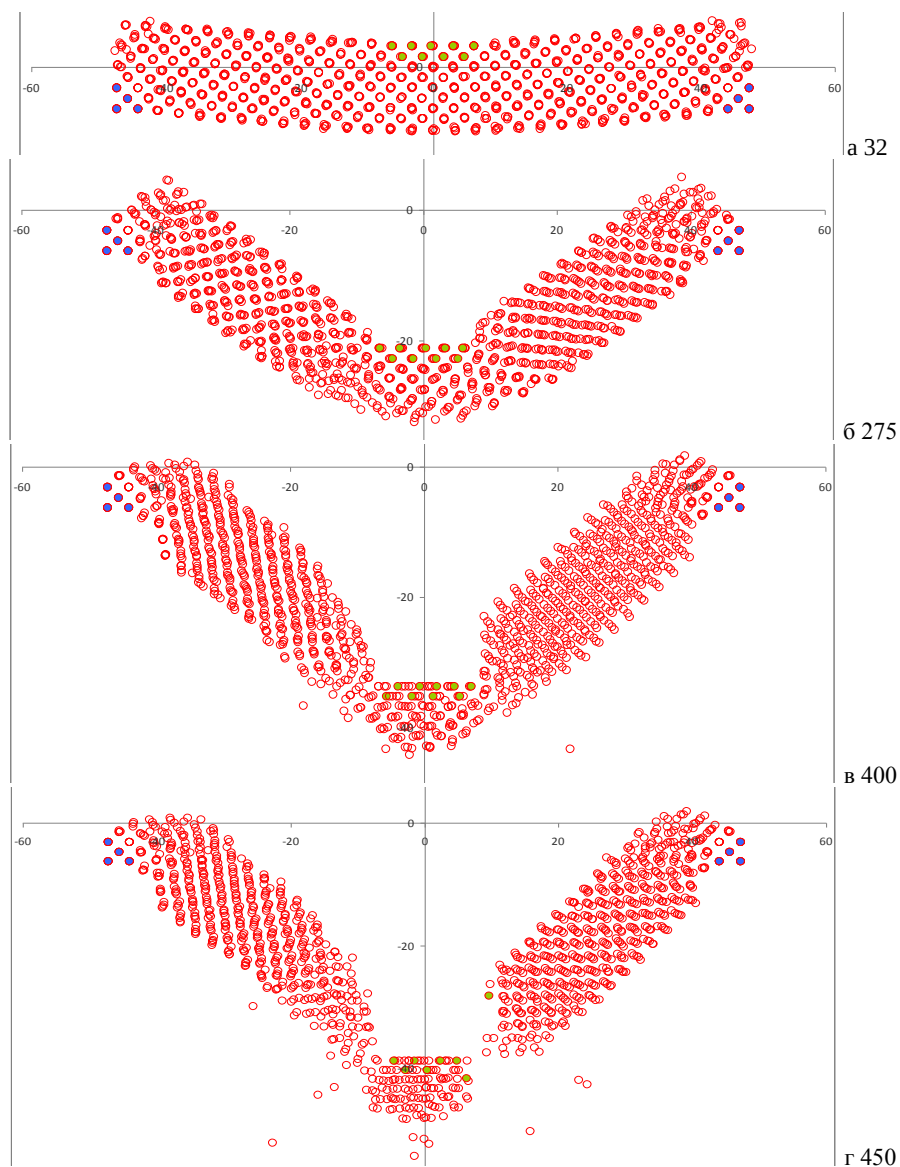


Рисунок 2 – Атомно-структурные перестройки при деформации изгибом нанобалки из молибдена при температуре 1000 К.
Число итераций $\times 100$: а – 32; б – 275; в – 400; г – 450

На начальной стадии деформирования (рисунок 2, стадия а, количество итераций 3200) атомы под ножом перемещаются вниз, вызывая упругий изгиб нанобалки монотонной кривизны. После 12800 итераций (стадия б) стрела прогиба составляет 1,3 нм. При дальнейшей деформации хаотические смещения атомов локализуются в зоне под ножом (стадия в), а концевые участки нанобалки становятся прямолинейными, испытывая деформацию одноосного растяжения. Нанобалка претерпевает неупругий

излом в центральной зоне под ножом. Процесс вязкого течения материала в центральной части при 15000 итераций сопровождается испарением атомов и разрыхлением этой зоны (стадия г). При 40000 итераций по обеим сторонам ножа образуются шейки, в которых происходит вязкое течение материала и испарение отдельных атомов (стадия в). Деформация в центральной зоне сопровождается глубоким выдавливанием материала. Стрела прогиба монотонно увеличивается и достигает 4,5 нм при отрыве центральной зоны балки под ножом (стадия г). Прямолинейные стороны поворачиваются в направлении центральной части в продолжение всего процесса деформации.

При температуре деформации 2800 К до момента разрушения выполнено 21000 итераций смещений атомов под ножом. Выделены стадии эксперимента с характерными атомно-структурными состояниями. На рисунке 3 показана анимация атомно-структурных перестроек, полученных в данном опыте.

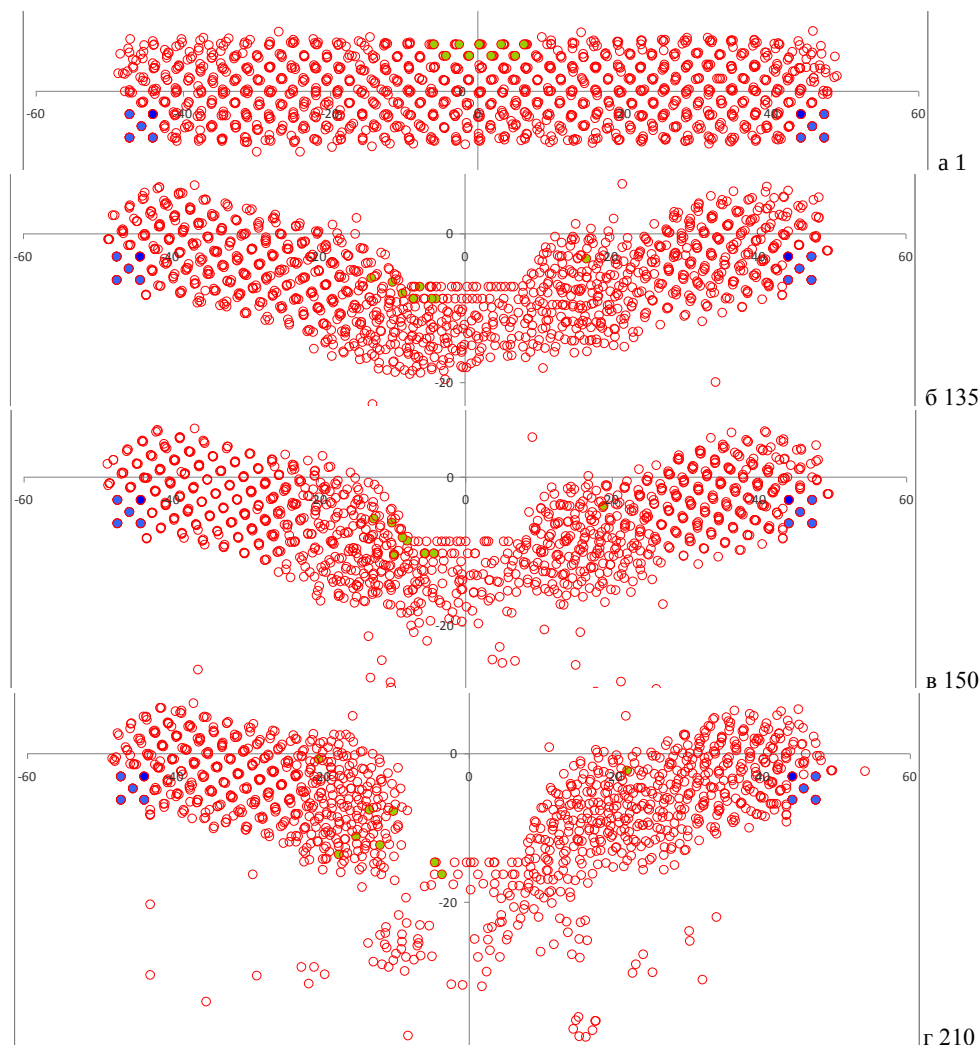


Рисунок 3 – Атомно-структурные перестройки при деформации изгибом нанобалки из молибдена при температуре 2800 К.
Число итераций $\times 100$: а – 1; б – 135; в – 150; г – 210

На начальной стадии деформирования (рисунок 3, стадия а, количество итераций 100) атомы под ножом перемещаются вниз, вызывая квазиупругие смещения остальных атомов нанобалки. После 13500 итераций (стадия б) в зонах, прилегающих к ножу, возникают хаотические смещения атомов, характерные для вязкого течения материала. Имеет место диффузионное перемещение атомов, принадлежащих ножу. Стрела прогиба составляет 1,5 нм. Противоизгиб нанобалки не наблюдается и по всей длине имеет место одноосное растяжение. При дальнейшей деформации хаотические смещения атомов локализуются в зоне, прилегающей к ножу (стадия в) и под ножом образуется зона выдавливания. Процесс вязкого течения материала при 15000 итераций сопровождается испарением атомов и разрыхлением зоны под ножом. Образовавшаяся шейка в процессе деформации перемещается справа налево и после 21000 итераций происходит отрыв атомов с левой стороны ножа (стадия д). Стрела

прогиба при разрушении составляет 1,5 нм, т.е., начиная со стадии «б», общая деформация нанобалки прекращается и происходит вытекание и испарение атомов, находящихся под ножом.

Известно, что в переходных металлах с ОЦК решеткой при снижении температуры ниже $(0,15 - 0,20) \cdot T_{пл}$ ($T_{пл}$ – температура плавления, °К) наблюдается резкий рост напряжения течения и одновременно, в сравнительно узком интервале температур – резкое уменьшение пластичности. При этом характер разрушения изменяется от вязкого до хрупкого (или квазихрупкого) скола. Учитывая, что температура плавления молибдена составляет 2890 К, то этот эффект может наблюдаться при температурах от 430 К до 578 К. Следовательно, при деформировании изгибом образца при температуре 300 К (гомологическая температура составляет примерно $0,1 T_{пл}$) должен наблюдаться хрупкий характер разрушения, а при температурах 1000 К и выше – вязкий. Однако в наших опытах характер разрушения остается вязким во всем исследованном диапазоне температур от 300 К до 2800 К. Следовательно, поведение нанобалки при деформировании в области температур ниже порога хрупкости не соответствует классическим представлениям о природе хладноломкости тугоплавких металлов. Низкотемпературная хрупкость тугоплавких металлов является главным фактором, ограничивающим широкое использование этих металлов в технике.

Полученные результаты по деформированию молибдена в широком температурном диапазоне позволяют сделать заключение об особом характере атомно-структурных перестроек, происходящих в нанообъектах и высказать оптимистичные предположения о возможности решения проблемы хрупкости тугоплавких металлов путем создания наноструктурных состояний материала.

Дальнейшее развитие работы предполагает применение статистических методов оценки наблюдаемых эффектов атомно-структурных перестроек, особенно на этапе локализации деформации в области шеек и создание на этой основе математической модели, описывающей кинетику разрушения нанообъекта. Другим направлением развития работы является разработка методического обеспечения лабораторных работ по тематике «компьютерное моделирование на ПЭВМ деформации нанообъектов» по дисциплине «Нанотехнологии» для студентов специальностей «Технология машиностроения» и «Металлорежущие станки и системы».

Библиографический список использованной литературы

1. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета / М. Рит. — Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. — 160 с.
2. Огородников В.В. Компьютерное моделирование в материаловедении / В.В. Огородников, В.В. Покропивный, М.Б. Штерн // Неорганическое материаловедение. — К.: Наук. думка, 2008. — Т. 1. — С. 1092–1145.
3. Огородников В.В. Компьютерное исследование атомного механизма деформации и разрушения нанокристаллов хрома / В.В. Огородников, К.В. Малишевский // Электронная микроскопия и прочность материалов. — Киев: ИПМ НАН Украины, 2001. — Вып. 11. — С. 34–46.
4. Деформація нанокристала ніобію абсолютно жорстким клином / В.В. Огородников, К.В. Малишевський, В.М. Фомін, І.Ф. Головнєв. // Труды ИПМ им. И.Н. Францевича НАН Украины. Сер. Моделирование в материаловедении. Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. — Киев: ИПМ НАН Украины, 2009. — Вып. 11. — С. 20–36.

Поступила в редакцию 10.06.2010 г.

Мурзін Л.М., Чубов С.А., Огородников В.В. Особливості деформації нанооб'єктів

У даній роботі представлені результати дослідження деформації нанобалки з молибдену, виконані методами комп'ютерного моделювання. Вивчені стани в процесі деформації вигином комплексу атомів у формі призматичного тіла розмірами перетину 5×5 атомів і завдовжки 31 атом. Зафіксовані атомно-структурні перебудови нанооб'єкту на етапах від початку деформації до руйнування.

Ключові слова: нанобалка, вигин, деформація, атомно-структурна перебудова, комп'ютерне моделювання.

Murzin L.M., Chubov S.A., Ogorodnikov V.V. Features of deformation of nanoobjects

Analysis results of the molybdenum nanobeam's deformation, carried out by means of computer modeling, are presented in the article. The states are studied in the process of deformation by the bend of the complex of atoms in the form of a prismatic body of the following sizes: 5×5 atoms cross-section and 31 atoms long. Atom-structural alterations of a nanoobject are fixed at stages from the beginning of deformation to destruction.

Keywords: nanoobject, nanobeam, bend, deformation, atomic-structural alteration, computer design.