

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДЕФОРМАЦИИ В НАНОВОЛОКНАХ ГЦК НИКЕЛЯ, С ЗАПОЛНЕНИЕМ ПОР АТОМАМИ ВОДОРОДА ДО 20 ПРОЦЕНТОВ

© 2016 г. М.Д. СТАРОСТЕНКОВ, О.В. ЯШИН

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул
e-mail: rubtsovsk@inbox.ru

Введение

В представленной работе с привлечением метода молекулярной динамики проведено исследование процессов структурно-энергетических превращений, наблюдаемых во время деформации нановолокон ГЦК Ni, содержащих атомы водорода в октаэдрических и тетраэдрических порах.

Математическая модель, методика и способы проведения эксперимента

В качестве объекта исследования в работе выступают нановолокна сплава чистого ГЦК металла Ni, с ориентацией осей растяжения в направлениях $\langle 100 \rangle$. Данный материал в упорядоченном состоянии имеют упаковку компонент, соответствующую сверхструктуре $L1_2$ [1]. Нановолокно Ni представляло собой параллелепипед размерами $4.05 \times 4.05 \times 7.57$ нм, по направлениям $\langle 010 \rangle$, $\langle 001 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ соответственно, вдоль направления $\langle 100 \rangle$ по краям нановолокна располагались атомы, составляющие абсолютно жесткие захваты, толщина каждого захвата составляла четыре атомных плоскости (100). Подобные ГЦК волокна исследовались ранее [2]. В октаэдрические и тетраэдрические поры волокна помещались атомы водорода. В представленной работе в нановолокнах заполнялись водородом 20 % пор, по одному атому водорода в каждой поре. Соотношение количества атомов водорода в октаэдрических и тетраэдрических порах нановолокна соответствовало соотношению суммарного объема октаэдра и тетраэдров в элементарной ячейке.

Для расчета траектории движения атомов применен метод молекулярной динамики. Данный подход является наиболее информативным, так как позволяет получить картины состояний системы не только на начальном этапе не оптимального расположения атомов блока и после достижения системой минимума энергии, но и между этими моментами, что дает возможность изучить механизмы атомной перестройки в исследуемом материале. Метод молекулярной динамики применяется во многих задачах физики конденсированного состояния [3]. В случае, когда система состоит из большого числа атомов, неизбежны вычислительные и временные затраты. Поэтому моделирование удается проводить на промежутке времени, составляющем до нескольких наносекунд [4]. В настоящем исследовании длительность экспериментов в большинстве случаев не превышала 0.6 нс (600 пс). Преимуществом данного метода является возможность получения детальной информации о структуре вещества и термодинамических характеристиках [5]. Данный метод дает возможность получать сведения о системе, которые можно сравнить с экспериментальными данными.

При моделировании деформации в нановолокнах производилось периодически повторяющееся поступательное смещение атомов, составляющих абсолютно жесткие захваты вдоль оси растяжения нановолокна в противоположных направлениях друг от друга. Суммарная скорость движения захватов составляла 20 м/с и соответствовала скорости деформации порядка 10^9 с^{-1} . Температура в компьютерном эксперименте устанавливалась равной 50 К, 300 К, 600 К, 900 К и 1200 К. В начале компьютерного экс-

перимента температура задавалась через начальные скорости атомов. При деформации нановолокна производилась термостабилизация в соответствии с алгоритмом Бендсена.

Результаты и обсуждение

В результате исследования структурно-энергетических превращений происходящих в нановолокнах ГЦК Ni с 20% заполненных водородом пор, в процессе высокоскоростной деформации растяжения выявлено четыре основных стадии деформации: квазиупругая (I), пластическая (II), течения (III) и разрушения (IV). Аналогичная картина выявлена в предшествующих работах по исследованию деформации нановолокон чистых металлов и сплавов, не содержащих водород [2-18]. На каждой стадии деформации реализовывались характерные для нее механизмы структурно-энергетических превращений в нановолокне.

При температуре 50 К на полученных графиках зависимости запасенной энергии деформации, приходящейся на один атом и напряжения на захватах от времени эксперимента видны все четыре стадии деформации нановолокна. Откольная прочность нановолокна составила 22.8 ГПа. В нановолокне вплоть до разрушения локальных скоплений атомов водорода не наблюдалось.

Откольная прочность при температуре 300 К составила 21.9 ГПа. В процессе деформации на второй стадии в нановолокне образовалось одно скопление атомов водорода глобулярной формы, состоящее из 12 атомов водорода. Данное скопление образовалось в области, где в последующем происходило образование «шейки» и дальнейшее разрушение.

При температуре 600 К наблюдается качественно иная картина в поведении графиков зависимости запасенной энергии деформации и графиков зависимости напряжений на абсолютно жестких захватах от времени эксперимента. На стадии пластической деформации (II) видны периодически повторяющиеся пики. Данные пики появляются при движении краевых дислокаций, которое в ГЦК металлах осуществляется преимущественно путем скольжения участков нановолокна вдоль плоскостей семейства {111}. В ходе подобных смещений атомы водорода, равномерно распределенные по октаэдрическим и тетраэдрическим порам, объединяются в скопления или кластеры. Очевидно, что количество подобных глобулярных образований зависит от длительности второго и третьего этапов деформации и интенсивности образования краевых дислокаций на данном этапе. В приведенном эксперименте на втором этапе образовалось восемь областей из атомов водорода. Значение откольной прочности составило 18.8 ГПа.

При температуре 900 К в нановолокне $\langle 100 \rangle$ Ni, содержащем водород, наблюдалась картина во многом схожая наблюдаемой при температуре 600 К. На второй и третьей стадии деформации образовалось 17 скоплений атомов водорода. Величина откольной прочности составила 16.6 ГПа.

При температуре 1200 К в нановолокне $\langle 100 \rangle$ Ni, содержащем водород, наблюдалось испускание водорода с поверхности нановолокна, скоплений атомов водорода не образовывалось, значение откольной прочности составило 14,0 ГПа.

Полученные результаты показали более высокое значение откольной прочности для нановолокон Ni, содержащих водород, в сравнении с результатами, полученными ранее для нановолокон Ni без водорода [2]. Значения откольной прочности отличаются на величину от 0.75 до 1.1 ГПа для всех температур, кроме температуры 1200 К, где разница значений не превышает 0.05 ГПа.

Заключение

Очевидно, в случаях сверхбыстрых деформаций атомы водорода в ГЦК Ni играют роль в процессах структурно-энергетических превращений. Влияние включений из атомов водорода отражается более высоким пределом текучести, а также большей длительностью стадии пластической деформации и течения, на которых наблюдается образование глобулярных (шаровидных) скоплений атомов водорода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-58-04033 Бел_мол_а и БРФФИ в рамках проекта № Т15РМ-09, проектов РФФИ №№: 14-08-90416 Укр_А, 15-48-04127 р_Сибирь_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Старостенков М.Д., Яшин А.В., Яшин О.В.* Моделирование процессов деформации в нановолокнах ГЦК никеля, содержащих атомы водорода // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2016. Т. 13. № 2. С. 210-216.
2. *Яшин А.В.* Исследование особенностей и стадий деформации нановолокон ряда металлов и сплава Ni₃Al на основе ГЦК решетки // *Диссертация на соискание ученой степени*. Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова. Барнаул, 2010, 221 с.
3. *Яшин А.В., Старостенков М.Д., Сосков А.А., Сеница Н.В.* Структурная перестройка в нановолокне CuAu I при одноосной деформации растяжения в направлении <100> // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2012. Т.9. №4-2. С. 640-645.
4. *Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Полетаев Г.М.* Низкотемпературное растворение поры вблизи поверхности кристалла под воздействием ударных волн // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2013. Т. 10. № 2. С. 254-260.
5. *Starostenkov M.D., Yashin O.V., Yashin A.V., Romanenko V.V.* The investigation of the behavior yield strength for Ni₃Al nanowires, depending on the presence of planar defects // В сборнике: *Effect of external influences on the strength and plasticity of metals and alloys Book of the International seminar articles*. Edition in Chief: Professor Sc. D., Starostenkov M.D.. 2015. С. 83-85.