

УДК 539.22.26

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В НАНОКРИСТАЛЛЕ НА ОСНОВЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА

Е.А. Дудник, М.С. Скоробогатов

*Рубцовский индустриальный институт*

*Филиал ФГБОУ ВПО Алтайского государственного технического университета*

*им. И.И. Ползунова, 658207, Рубцовск, ул. Тракторная, 2/6*

*evgdudnik@yandex.ru*

**Аннотация:** Моделирование процесса интенсивной пластической деформации направлено на выявление механизмов структурных переходов в нанокристалле на основе интерметаллида  $Ni_3Al$ . Для анализа структуры использованы симплексы Вороного-Делоне, которые позволяют проследить динамику формирования упорядоченных областей в процессе деформирования.

**Ключевые слова:** нанокристалл, интенсивная пластическая деформация.

### 1. Введение

Автоматизация управления производством и технологическими процессами невозможна без развития теоретической основы, экспериментальных методов, знаний и навыков в предметной области. Исследование атомных механизмов интенсивной пластической деформации представляет собой сложный, многофакторный процесс, ввиду разнообразия их проявления и сверхчувствительности к внутренним и внешним факторам. Большое количество ученых занимается исследованиями закономерностей влияния интенсивной пластической деформации на прочностные свойства материалов [1-3]. В развитии новых технологий создания материалов с оптимальными свойствами отводится важная роль отводится изучению структурных механизмов в кристаллах, все большую популярность получают методы имитационного моделирования физических процессов [4-5]. Изучение процессов структурной трансформации на атомном уровне, вплоть до наблюдения движения каждого атома методом компьютерного моделирования, является актуальным. С использованием разбиения Вороного-Делоне можно наиболее полно и точно отследить особенности эволюции структуры нанокристалла. Использование геометрических идей Вороного и Делоне для анализа структуры атомарной системы содержит структурную информацию о взаимоположении частиц и характеризует локальный порядок в системе [6-7].

Целью работы является выявление методом разбиения Вороного-Делоне атомных механизмов структурных переходов в процессе интенсивной пластической деформации, приводящей к скачкообразному

изменению прочностных свойств в нанокристалле на основе модельного сплава  $Ni_3Al$ . Методом молекулярной динамики исследованы особенности образования доменных упорядоченных структур в нанокластере при внешнем воздействии, изучено поведение атомов путем анализа равновесного состояния нанокристалла после деформации, а также выявлены атомные механизмы структурной перестройки. Задача моделирования является достаточно актуальной, так как не ясны условия появления механизмов структурных переходов, и невозможно точно предсказать конечное состояние и свойства кристалла под воздействием деформации.

## 2. Методика проведения компьютерного эксперимента

Объектом исследования является нанокристалл на основе  $Ni_3Al$ . Атомы находятся в узлах трехмерной кубической гранецентрированной кристаллической решетки ( $24 \times 24 \times 24$  атомов). В качестве граничных условий задаются координаты и скорости атомов. В начальный момент времени: начальные положения атомов определены узлами кристаллической решетки, начальные скорости атомов полагаются равными нулю. Краевые условия представляют собой матрицу в виде куба, соединенную с фильерой (усеченной четырехугольной пирамидой в нижней части). Принципиальная схема метода интенсивной пластической деформации (ИПД) представлена на рис. 1.

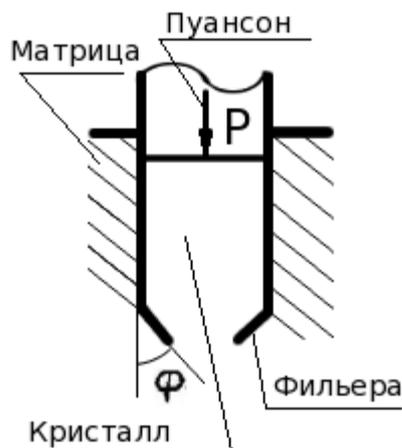


Рис. 1. Принципиальная схема метода интенсивной пластической деформации

Пуансон оказывает непосредственное давление на обрабатываемый нанокристалл, при прохождении через фильеру, формирующую часть установки, происходит выдавливание кристалла через отверстие. Таким образом активизируются механизмы интенсивной пластической деформации, и затем происходит преобразование структуры кристалла в

конечное равновесное состояние, характеризующееся минимумом энергии системы. При моделировании процесса деформации использовались следующие характеристики: угол сужения фильеры ( $11^\circ$ ), скорость пуансона ( $2 \text{ \AA/пс}$ ).

Предварительным этапом работы является расчет разбиения Вороного-Делоне изучаемой системы, которое дает необходимую информацию для дальнейшего структурного анализа. Разбиение Вороного-Делоне изучаемой системы строится с помощью гибридного рекурсивно-инкрементного алгоритма [8]. Выделяем из общей массы симплексов два вида: тетраэдры и квартоктаэдры. Для принадлежности к тетраэдрам вводится характеристика тетраэдричности:

$$T = \sum (e_i - e_j)^2 / 15 \langle e \rangle^2. \quad (1)$$

Здесь  $e_i$  и  $e_j$  – длины  $i$ -го и  $j$ -го ребер;  $e$  – средняя длина ребра данного симплекса. Число 15, используемое для нормировки, есть количество возможных пар ребер симплекса. Для совершенного тетраэдра величина  $T$  равна нулю. Малое значение меры однозначно указывает на то, что данный симплекс близок по форме к совершенному тетраэдру. Для однозначного выделения квартоктаэдров мы используем специальную меру  $Q$  – квартоктаэдричность [7]:

$$Q = \left( \sum_{\substack{i < j \\ j \neq m}} (e_i - e_j)^2 + \sum_{i \neq m} (e_i - e_m)^2 / \sqrt{2} \right) / 15 \langle e \rangle^2. \quad (2)$$

Эта мера аналогична мере  $T$ , только теперь при расчете дисперсии длин ребер учитывается, что одно ребро в 2 раза длиннее остальных. Для расчета  $Q$  сначала находится самое длинное ребро симплекса –  $m$ , и затем производится расчет по формуле (2). Для квартоктаэдра, близкого к совершенному, значение меры стремится к нулю, и, наоборот, малое значение  $Q$  указывает, что форма симплекса близка к совершенному квартоктаэдру. Анализ взаиморасположения групп данных симплексов позволяет судить о динамике структурных изменений и выявить атомные механизмы образования упорядоченных областей.

### **3. Обсуждение результатов**

Изменение структуры кристалла под воздействием пластической деформации применяется в большинстве упрочняющих технологий обработки конструкционных материалов и сплавов. В ходе компьютерного эксперимента на основе геометрического анализа структуры были выявлены атомные механизмы образования упорядоченных областей (доменов), сформировавшиеся под действием интенсивной пластической

деформации, которые являются упрочняющей основой материала и служат причиной повышения твердости нанокристалла на основе  $Ni_3Al$ .

Построение области пространства с использованием характеристик симплексов Вороного – Делоне (1) и (2) позволило исследовать особенности строения некристаллической фазы. В течение 140 пс модельный нанокластер подвергался интенсивной пластической деформации, затем был проведен анализ структурных особенностей на 115 и 121 пс. Динамика образования нанокластеров отражена на рис. 2.

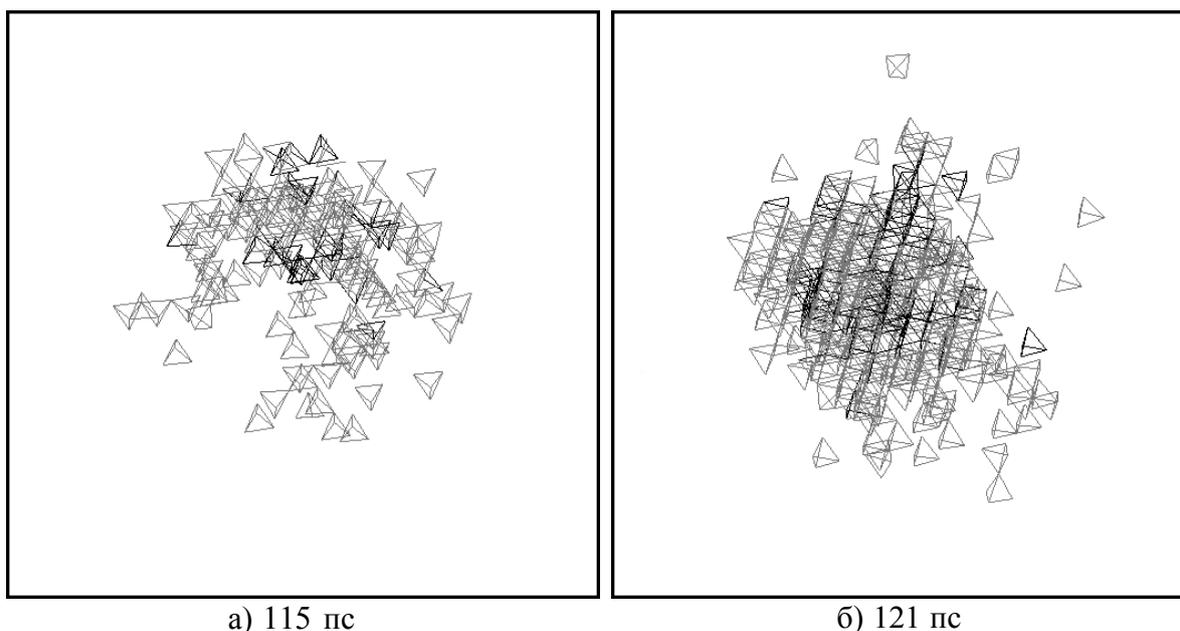


Рис. 2. Динамика образования симплексов Вороного-Делоне в нанокластере. Темным цветом показаны тетраэдры, светлым – квартоктаэдры

Как видно из рисунка, процесс образования упорядоченной области, состоящей из различного вида симплексов: тетраэдров и квартоктаэдров. Также отметим, что в процессе деформации наблюдается увеличение количества симплексов в группе и расширение упорядоченной области симплексов.

В процессе эксперимента получены зависимости тетраэдричной и квартоктаэдричной фазы от времени в течение 140 пс при интенсивной пластической деформации (рис. 3). Как видно из рисунка, основную массовую долю «хороших» симплексов, близких к совершенным, составляют квартоктаэдры, хотя в начальный момент времени их количество было близко к нулю. Получены качественные зависимости от времени объема тетраэдричной и квартоктаэдричной фаз. Наблюдалось увеличение доли квартоктаэдров и уменьшения доли тетраэдров с течением времени компьютерного эксперимента в нанокластере. Тетраэдричная фаза постепенно уменьшается с течением времени, квартоктаэдричная же,

напротив, стремительно возрастает. К окончанию эксперимента тетраэдричная фаза наблюдается лишь на границе нанокластеров. Можно сделать вывод о стремлении системы к образованию упорядоченного кластера в форме квартоктаэдров после деформации.

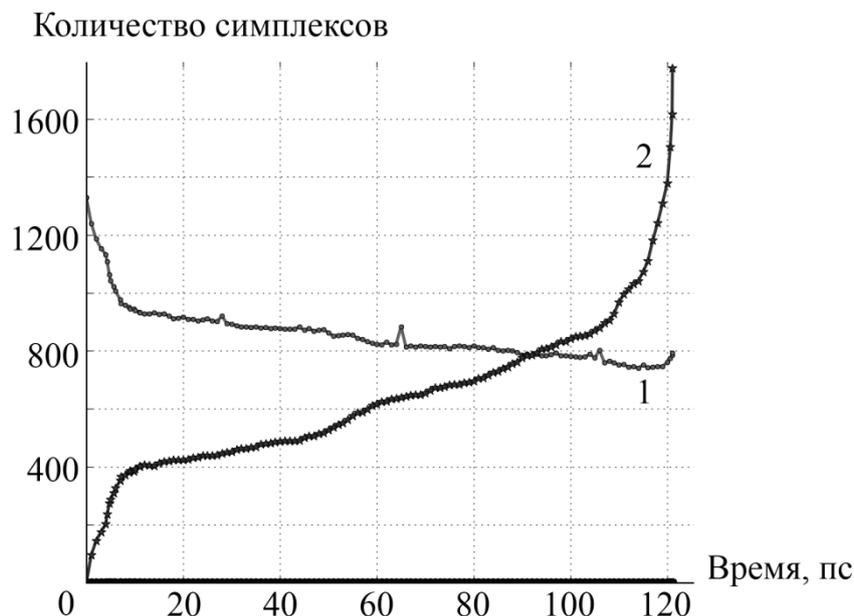


Рис. 3. Зависимость количества симплексов от времени компьютерного эксперимента. Обозначения: 1 - тетраэдры, 2 - квартоктаэдры

#### 4. Особенности программной реализации

Межатомное взаимодействие задавалось с помощью многочастичного потенциала Клери-Розатто [9], который определяется потенциальной функцией парного взаимодействия Борна-Маера и функцией учета электронной плотности атома:

$$U_{TB} = U_R + U_B,$$

$$U_R = \sum_{i=1}^n \eta_i A_{\alpha\beta} \exp \left[ -p_{\alpha\beta} \left( \frac{r_i}{r_0} - 1 \right) \right], U_B = - \sqrt{\sum_{i=1}^m \eta_i \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left[ -2q_{\alpha\beta} \left( \frac{r_i}{r_0} - 1 \right) \right]},$$

где  $r_0$  — равновесное расстояние до соседей первой координационной сферы,  $\eta_i$  — число атомов в  $i$ -координационной сфере,  $A_{\alpha\beta}, \xi_{\alpha\beta}, p_{\alpha\beta}, q_{\alpha\beta}$  — параметры потенциала,  $r_i = k_i a$  — радиус  $i$ -координационной сферы,  $a$  — параметр решетки,  $k_i = \sqrt{i/2}$  — масштабирующий коэффициент,  $n, m$  — число учитываемых координационных сфер для парного и многочастичного вкладов.

Траектории движения атомов были описаны уравнением движения Ньютона, частные решения получены конечно-разностным методом прогноза и коррекции четвертого порядка точности, ошибка вычисления

составляет  $O(h^5)$ . Для ускорения вычисления модельный нанокристалл разбивался на кластеры, со сторонами не превышающими 3-х межатомных расстояний, что позволяет существенно ускорить перебор ближайших соседей при расчете взаимодействия атома с его окружением. В зависимости от размера кластера и кристалла, ускорение эксперимента составило до 4-х порядков.

Параллельное вычисление реализовано с помощью *OpenMP* – открытый стандарт для распараллеливания программ на языках *Cu*, *Cu++* и Фортран. Параллельные вычисления в *OpenMP* с помощью многопоточности. Предполагается, что потоки выполняются параллельно на машине с несколькими процессорами, стоит отметить, что *OpenMP* автоматически настраивается под аппаратное обеспечение.

Для визуализации динамических процессов в базу данных *SQLite* сохранялись необходимые расчетные данные эксперимента. Процесс моделирования атомарной системы продолжителен по времени, поэтому идея сохранения параметров экспериментов, таких как координаты атомов, позволить провести детальный анализ структурных механизмов процесса интенсивной пластической деформации. К тому же доступ к данным эксперимента можно без труда получить из других программ, например для анализа или построения графиков зависимости важных характеристик, которые не были предусмотрены разработчиками.

## 5. Выводы

Проведено моделирование процесса интенсивной пластической деформации, проведен анализ динамики структуры нанокристалла. Установлена зависимость тетраэдричной и квартоктаэдричной фазы от времени. В начальный момент времени структура нанокристалла соответствовала тетраэдричной фазе, затем, под воздействием интенсивной пластической деформации в структуре начинает преобладать квартоктаэдричная фаза. После проведения эксперимента, нанокристалл упрочняется за счет перестройки атомов в более плотную структуру с образованием квартоктаэдричной фазы.

В программе реализована возможность исследования динамики развития структурного перехода, который влияет на изменение прочностных свойств нанокристалла.

## Библиографический список:

1. **Валиев, Р.З.** Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией / Р.З. Валиев, И.В. Александров. – М.: Логос, 2000. – 272 с.
2. **Андреевский, Р.А.** Прочность наноструктур / Р.А. Андреевский, А.М. Глезер //

Успехи физических наук. – 2009. – Т. 179. – № 4. – С. 337-358.

3. **Поздняков, В.А.** Физическое материаловедение наноструктурных материалов / В.А. Поздняков. – М.: МГИУ, 2007. – 424 с.

4. **Перевезенцев, В.И.** Фрагментация при пластической деформации металлов: учеб. пособие / В.И. Перевезенцев, Г.Ф. Сарафанов. – Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2007. – 127 с.

5. **Панин, А.В.** Особенности локализации и стадийности пластической деформации субмикроструктурного армко-железа с полосовой фрагментированной субструктурой / А.В. Панин, А.А. Сон, Ю.Ф. Иванов, В.И. Копылов // Физическая мезомеханика. – 2004. – Т. 7. – № 3. – С. 13-16.

6. **Медведев, Н.Н.** Метод Вороного–Делоне в исследовании структуры некристаллических систем / Н.Н. Медведев. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.

7. **Медведев, Н.Н.** Гомогенная кристаллизация Леннард-Джонсовской жидкости. Структурный анализ с помощью симплексов Делоне / А.В. Аникеенко, Н.Н. Медведев // Журнал структурной химии. – 2006. – Т. 47. – № 2. – С. 273-282.

8. **Скворцов, А.В.** Триангуляция Делоне и её применение / А.В. Скворцов. – Томск: Изд-во Томского университета, 2002. – 128 с.

9. **Cleri, F.** Tight-binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato. Physical Review B. – 1993. – V. 48. – №. 1. – P. 22-33.