

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ НА СТРУКТУРУ НЕРАВНОВЕСНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН

Назаров А.А.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН  
г. Уфа, Россия, E-mail: AANazarov@imsp.ru

Процесс получения ультрамелкозернистых (УМЗ), в том числе наноструктурных, материалов методами пластической деформации, такими как кручение под высоким давлением (КВД), равноканальное угловое прессование (РКУП) и др., приводит к формированию в металлах и сплавах сильно неравновесной структуры, характеризующейся дефектами дислокационного и дисклинационного типа в границах и стыках зерен [1]. В этом состоянии материалы обладают высоким уровнем внутренних напряжений и запасенной энергии. Наряду с высокой прочностью, УМЗ материалы имеют относительно низкую пластичность и термическую стабильность структуры.

В последние годы в совместных работах исследователей из ИПСМ РАН и ИТА НАН Беларуси было установлено, что ультразвуковая обработка (УЗО) значительно влияет на микроструктуру УМЗ металлов и имеет потенциал повышения указанных характеристик без потери в достигнутой измельчением зерен прочности [2,3].

Одной из проблем, представляющих большой фундаментальный интерес, является проблема выяснения микромеханизма влияния ультразвука на структуру границ зерен (ГЗ) в УМЗ металлах. Перспективным методом исследования этой проблемы является атомистическое моделирование методом молекулярной динамики (МД). Настоящая работа посвящена выяснению механизма релаксации неравновесной структуры ГЗ при знакопеременном нагружении методом МД.

Наиболее типичными дефектами, характеризующими неравновесную структуру ГЗ в УМЗ металлах, полученных пластической деформацией, являются стыковые дисклинации, которые связаны в дипольные и мультипольные (в частности, квадрупольные) конфигурации [1]. В работе [4] ранее была предложена качественная модель, согласно которой воздействие ультразвука инициирует дислокационные процессы, которые компенсируют стыковые дисклинации и приводят к релаксации их поля напряжений.

Для прямого моделирования одного из таких процессов – генерации дислокаций границей зерен, была рассмотрена граница наклона [112] в никеле. Для описания межатомного взаимодействия был использован потенциал метода внедренного атома, подогнанный к параметру решетки  $a_0 = 3.52 \text{ \AA}$ , энергии связи  $\varepsilon_0 = 4.45 \text{ эВ}$  и к другим параметрам никеля [5]. Расчетная ячейка для моделирования была построена следующим образом. Вначале строился бикристалл, содержащий бездефектную границу наклона с плотностью совпадающих узлов  $\Sigma=15$  и углом разориентировки  $\theta=78.46^\circ$ . Направление оси  $z$  ячейки совпадало с кристаллографическим направлением [112], оси  $y$  – с перпендикулярным к оси наклона направлением границы зерен. В этих направлениях были использованы периодические граничные условия. Соответственно, размер ячейки вдоль оси  $z$  равнялся  $H_z = \frac{z}{2}[112] = 12.93 \text{ \AA}$ , оси  $y$  –  $H_y = 20h_y = 157.4 \text{ \AA}$ , где  $h_y = \sqrt{5}a_0$  – период границы  $\Sigma=15 / \theta=78.46^\circ$ . В направлении оси  $x$  система имела ограниченный размер, равный  $150 \text{ \AA}$  и, соответственно, открытые поверхности. С целью исключения поверхностных атомов из расчета энергии системы, около каждой поверхности были выделены атомы, расположенные в слое толщиной  $15 \text{ \AA}$ . Далее в границу путем вырезания клиновых областей был введен диполь клиновых дисклинаций мощностью  $\Omega=11.2^\circ$  с плечом  $d=50 \text{ \AA}$ . Созданная таким образом система, состоящая из 27198 атомов, была подвергнута минимизации энергии при нуле температуры, а затем релаксации в течение времени 100 пс с шагом 2 фс при температуре 300 К. Полученный таким образом бикристалл далее подвергался знакопеременной деформации при той же температуре путем приложения

синусоидально изменяющегося напряжения в направлении оси  $y$   $p_y = p_{y0} \sin[(2\pi/T)t]$ , период изменения которого составлял  $T = 160$  пс. В остальных направлениях было наложено условие постоянного нулевого давления. Через каждые 2 пс конфигурация системы записывалась в файл формата XYZ, чтобы наблюдать динамику изменения структуры путем визуализации. Энергии атомов сохранялись после каждого периода нагружения. Моделирование осуществлялось с помощью программы XMD [6], а визуализация – с помощью программы OVITO [7]. Исследование было проведено при значениях амплитуды напряжения  $p_{y0} = 1; 1.5; 1.7$  и 2 ГПа.

Таким образом были изучены изменения структуры ГЗ в процессе деформации, генерация ей решеточных дислокаций, изменение размера расчетной ячейки в направлении оси  $y$ , изменение полной энергии атомов (за исключением поверхностных) с количеством циклов деформации.

На рисунке 1 приведены карты атомных энергий бикристалла в неравновесном состоянии (а) и после воздействия трех циклов нагружения с амплитудой 2 ГПа (б). Видно, что в первом состоянии большинство атомов в границе имеют высокую энергию, что связано с наличием поля напряжений дисклинационного диполя. Видно также, что происходит частичная релаксация – в зерне около ГЗ имеются области с высокой энергией атомов. Эти области представляют собой ядра опущенных границей решеточных дислокаций. Очевидно, при такой большой мощности дисклинационного диполя он способен испускать дислокации из границы даже в отсутствие внешнего воздействия. При знакопеременном нагружении граница генерирует решеточные дислокации, которые скольжением выходят на поверхности кристаллитов и не возвращаются в границу при изменении знака напряжения. В конечном состоянии (б) граница полностью свободна от дислокаций.

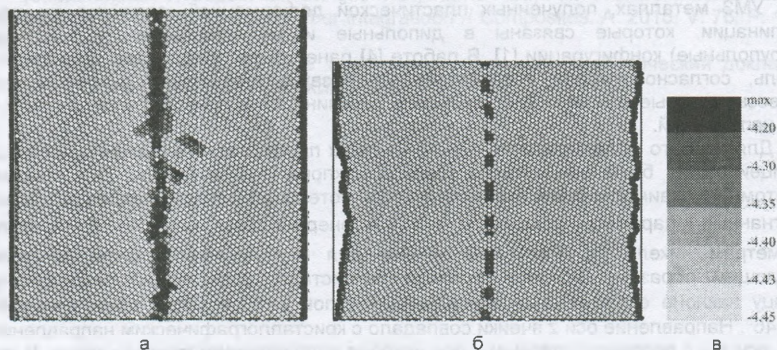


Рисунок 1 – Карты атомных энергий в бикристалле, содержащем дисклинационный диполь (а), и после деформации знакопеременным напряжением амплитудой 2 ГПа (б) при температуре 300 К; шкала энергий атомов, использованная при построении карт (в)

На рисунке 2 приведены графики изменения размера расчетной ячейки  $H_y$  со временем, а на рисунке 3 – изменения полной избыточной энергии атомов системы за исключением поверхностных слоев с количеством циклов.



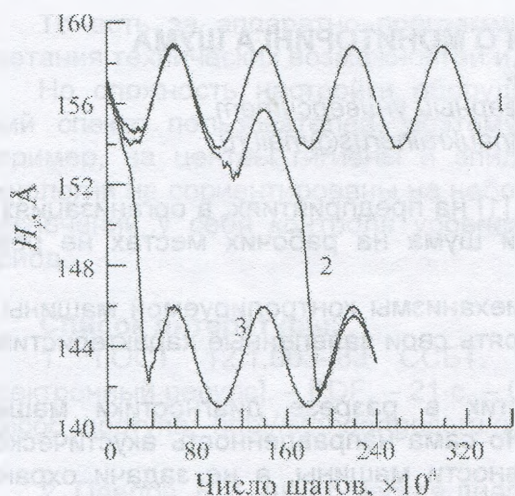


Рисунок 2 – Изменение размера расчетной ячейки с количеством циклов нагружения при амплитудах напряжений  $p_{y0} = 1.5$  (1), 1.7 (2) и 2 (3) ГПа

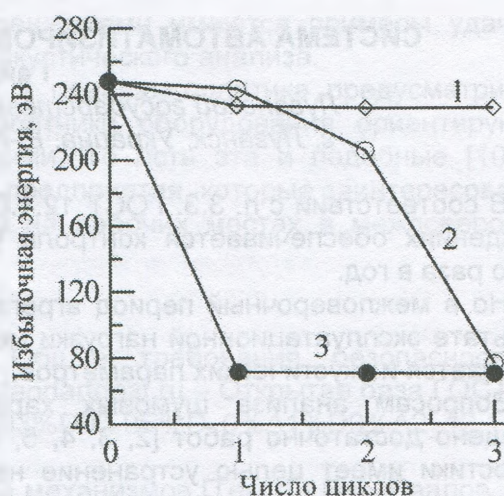


Рисунок 3 – Изменение избыточной энергии системы с количеством циклов нагружения при амплитудах напряжений  $p_{y0} = 1.5$  (1), 1.7 (2) и 2 (3) ГПа

Видно, что за счет пластической деформации бикристалла при генерации дислокаций и их выходе на поверхности необратимо уменьшается размер системы, и при этом происходит релаксация избыточной энергии границы зерен, связанной с ее неравновесным состоянием.

Работа была поддержана грантом Российского научного фонда № 16–19–10126.

#### Список литературы:

1. Nazarov A.A., Mulyukov R.R. Nanostructured Materials // Nanoscience, Engineering and Technology Handbook, Eds. S. Lyshevski, D. Brenner, J. Iafrate W. Goddard. USA, Boca Raton: CRC Press, P.22–1–22–41.
2. Назарова А.А., Мулюков Р.Р., Рубаник В.В., Царенко Ю.В., Назаров А.А. Влияние ультразвуковых колебаний на структуру и свойства ультрамелкозернистого никеля. ФММ. –2010. –Т.110, №6. – С. 600–607.
3. Samigullina A.A., Nazarov A.A., Mulyukov R.R., Tsarenko Yu.V., Rubanik V.V. Effect of ultrasonic treatment on the strength and ductility of bulk nanostructured nickel processed by equal-channel angular pressing // Rev. Adv. Mater. Sci. – 2014. – V. 39. – P. 14–34.
4. Назаров А.А., Самигуллина А.А., Мулюков Р.Р., Царенко Ю.В., Рубаник В.В. Изменение микроструктуры и механических свойств наноматериалов при ультразвуковом волновом воздействии // Пробл. машиностр. и надежн. машин. – 2014. – № 2. – С. 77–84.
5. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. B. – 1986. – V. 33, № 2. – P. 7983–7991.
6. XMD – molecular dynamics for metals and ceramics // <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.
7. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2010. –V. 18, No. 1. – Art No. 015012.