

Лабораторная работа № 7

Анализ деформационного поведения нанопленки NiAl

Цель: провести молекулярно-динамическое моделирование одноосного растяжения нанопленки NiAl и на основании численного расчета проанализировать деформационное поведение нанопленки NiAl.

Работа проводится на основе материала, представленного в [1-4]. Текст теоретической части взят и частично адаптирован из работы [1]. Исходные структуры представлены авторами.

Теоретическая часть

Наноматериалы привлекают внимание исследователей благодаря их необычным механическим и физическим свойствам. Поскольку прочность таких материалов может приближаться к теоретической, механизмы их деформации и разрушения могут иметь качественно новые черты. Нановолокна при некоторых условиях растяжения демонстрируют необыкновенно большие обратимые деформации. Так, например, в нановолокне из металла с ОЦК-решеткой был обнаружен эффект сверхупругости, который авторы связывают с механизмом обратимого двойникования структуры. В серии работ по атомному моделированию растяжения нановолокон из NiAl и CuZr обсуждается ряд интересных эффектов, таких как асимметрия деформации при растяжении/сжатии, псевдоупругое/псевдопластическое поведение и др.

Структурные изменения, наблюдаемые в образцах при их деформировании, авторы называют фазовыми превращениями. Однако в недавних работах по одноосному растяжению нанопленок и нановолокон из упорядоченных сплавов FeAl и NiAl было установлено, что деформация таких объектов связана с расщеплением структуры на домены с большей и меньшей степенью упругой деформации. Такое сосуществование доменов с разной степенью деформации возможно потому, что зависимость потенциальной энергии P от деформации ε при растяжении имеет область выпуклости (штриховая линия на рис. 1).

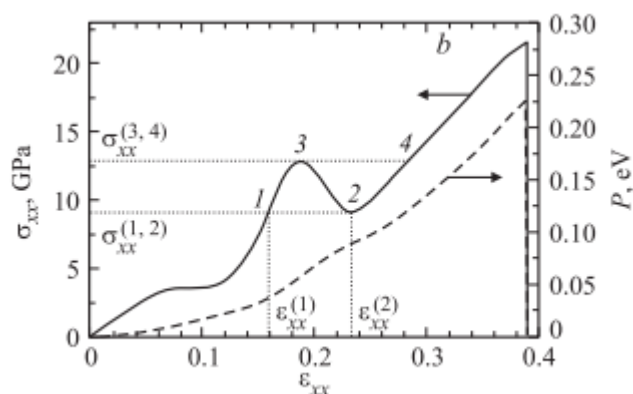


Рис. 1. Зависимость растягивающего напряжения σ_{xx} (сплошная линия) и потенциальной энергии на атом P (штриховая линия) от степени деформации ε_{xx} нанопленки из сплава NiAl при 0 К [10]. Кривые $P(\varepsilon)$ имеют область выпуклости вверх в интервале $\varepsilon_{xx}(1) < \varepsilon_{xx} < \varepsilon_{xx}(2)$, а кривые $\sigma(\varepsilon)$ имеют неустойчивый участок с отрицательной константой упругости $E = d\sigma/d\varepsilon$.

Линейная зависимость $P(\varepsilon)$ предполагает, что напряжение $\sigma(\varepsilon) = dP/d\varepsilon$ будет постоянным в интервале $\varepsilon_1 < \varepsilon < \varepsilon_2$. В данном диапазоне удлинение нанообъекта осуществляется за счет поглощения менее деформированных доменов (ε_1) более деформированными (ε_2). По достижении величины деформации ε_2 домены с деформацией ε_1 полностью исчезают, и дальнейшее растяжение протекает однородно. Наличие для

наноразмерных объектов участка кривой $\sigma(\varepsilon)$ с отрицательным наклоном означает отрицательность константы упругости $E = d\sigma/d\varepsilon$, т. е. термодинамическую неустойчивость деформации. Это приводит к неоднородной деформации наноразмерных объектов.

Поскольку наноматериалы, обладающие отрицательной жесткостью, могут найти новые приложения, их изучение представляется интересным. В наших недавних работах [10–12,14,15] были рассмотрены особенности одноосного растяжения наноразмерных объектов из сплавов NiAl и FeAl при температуре 0 К. Было показано, что полностью обратимая упругая деформация интерметаллидных нанопленок может протекать неоднородно, а их жесткость при неоднородном деформировании может быть отрицательной. Отметим, что существует ряд работ, в которых исследовалось влияние температуры на механизм одноосного растяжения нановолокон из сплавов и чистых металлов. Было установлено, что рост температуры не приводит к изменению механизма деформации, однако из-за облегчения зарождения дефектов в кристалле снижалось растягивающее напряжение. В настоящей работе изучается влияние температуры на отрицательную жесткость нанопленок из сплавов NiAl и FeAl при одноосном растяжении и проводится оценка температурной стабильности области неоднородного деформирования.

Практическая часть

Постановка модели

ОЦК-решетка сплава NiAl имеет упорядоченную сверхструктуру типа B2 с параметром решетки $a = 2.8712 \text{ \AA}$. Моделирование одноосного растяжения будет проводиться для двух расчетных ячеек, содержащих 29348 и атомов. На рис. 2 изображена расчетная ячейка для интерметаллидного сплава NiAl. Путем задания периодических граничных условий в направлениях x и z моделировалась бесконечная нанопленка со свободными поверхностями, перпендикулярными оси y . Результаты моделирования не чувствительны к размеру расчетной ячейки в направлении оси z и к размерам расчетной ячейки в направлениях x и y , если они превышают $3a$ (где a — параметр решетки).

Описание межатомного взаимодействия осуществлялось с помощью хорошо апробированных многочастичных потенциалов, рассчитанных методом погруженного атома Мишиным [5] для сплава NiAl. Уравнения движения атомов интегрировались с помощью метода Верле четвертого порядка с шагом по времени 1 фс. В работе задавались одинаковые условия деформации исследуемых сплавов. Одноосное растяжение нанопленки осуществлялось путем контроля деформации с постоянной скоростью деформирования.

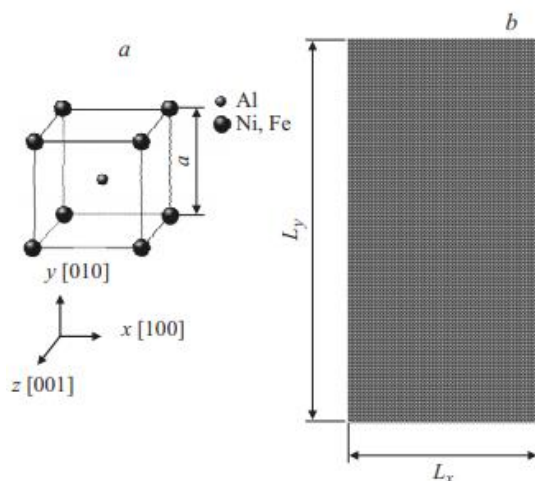


Рис. 2. а) Элементарная ячейка интерметаллидного сплава со сверхструктурой B2 на основе ОЦК-решетки с параметром решетки a . б) Расчетная ячейка нанопленки сплава NiAl

Растягивающее напряжение σ_{xx} прикладывается вдоль оси x , а остальные компоненты тензора напряжений поддерживаются равными нулю с использованием процедуры Паринелло–Рамана. При поддержании нулевыми всех компонент тензора напряжений, кроме растягивающего напряжения, будет происходить уменьшение толщины нанопленки с увеличением деформации растяжения. Моделирование проводится при температуре 300 К.

Задание 1.

Провести моделирование по вариантам согласно описанной модели.

1. Создать папку NiAl, выбрать соответствующую варианту структуру [NiAl111.dat](#) (варианты 1-12) или [NiAl557.dat](#) (варианты 13-24), скачать файл с потенциалом [NiAl_Mishin_2009_eam.alloy](#) и исполняемую программу [lmp_serial](#), а также файл с текстом программы [in.lammps](#).
2. Внести изменения в программу [in.lammps](#), где задать свою скорость деформации следующим образом:

В строках

```
49 fix 2          all deform 1 x scale 1.2 units box remap v # деформация на 20%
50
51 run          30000
```

задается команда [deform x scale](#) которая позволяет растянуть образец за время, заданное командой [run](#). **Варианты 1-6 и 13-18** задают количество шагов [run 20000](#), а **варианты 7-12 и 19-24** задают количество шагов [run 30000](#). В результате получим деформирование с разной скоростью, поскольку величина деформации одна и та же [scale 1.2](#), а время счета за которое пленка деформируется на эту величину – разное.

После того как изменения внесены, запустить программу командой [lmp_serial -in in.lammps](#)

Задание 2.

Проанализировать начальную структуру.

1. В VMD открыть файл [structure_NiAl.lammpstrj](#) и задать цвет атомов соответственно варианту (см. видеоподсказку)
2. Представить структуру в трех проекциях в VMD. Представить структуру в приближении в проекции на плоскость xu .

Задание 3.

Проанализировать кривые напряжение-деформация

В файл [stress.txt](#) записаны время счета, деформация ϵ_{xx} и шесть компонент напряжений σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} и σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz} . Построить на одном графике все шесть компонент в зависимости от деформации, а на втором графике компоненту σ_{xx} в зависимости от времени счета.

Задание 4.

С помощью программы OVITO проанализировать разные аспекты деформационного поведения по вариантам (смотрите видео инструкцию).

Задание 5. **Общее для всех вариантов.**

Сравнить кривые напряжение σ_{xx} в зависимости от деформации для двух структур при двух значениях скорости деформирования. Сравнить критические напряжения после которых началась пластическая деформация. Сравнить модуль Юнга для двух структур и двух скоростей деформации.

Варианты 1-12

Структура (111)

Скорость растяжения $\dot{\epsilon}_1$

Вариант 1 – напряжения σ_{xx} и напряжения σ_{xy} ; цвет в VMD 0 blue/ 1 red

Вариант 2 – напряжения σ_{yy} и напряжения σ_{yz} ; цвет в VMD 2 gray/ 3 orange

Вариант 3 – напряжения σ_{zz} и напряжения σ_{xz} ; цвет в VMD 0 blue/ 4 yellow

Вариант 4 – анализ ближайших соседей, анализ дислокаций и функция радиального распределения; цвет в VMD 1 red/ 6 green

Вариант 5 – изменение энергий и анализ изменения структуры в VMD; цвет в VMD 2 gray/ 9 pink

Вариант 6 – изменение шести компонент напряжений в одном диапазоне; цвет в VMD 0 blue/ 11 purple

Скорость растяжения $\dot{\epsilon}_2$

Вариант 7 – анализ ближайших соседей, анализ дислокаций и функция радиального распределения; цвет в VMD 4 yellow/ 11 purple

Вариант 8 – напряжения σ_{xx} и напряжения σ_{xy} ; цвет в VMD 3 orange/ 12 lime

Вариант 9 – изменение энергий и анализ изменения структуры в VMD; цвет в VMD 13 mauve/ 12 lime

Вариант 10 – напряжения σ_{yy} и напряжения σ_{yz} ; цвет в VMD 6 green/ 16 black

Вариант 11 – напряжения σ_{zz} и напряжения σ_{xz} ; цвет в VMD 21 cyan2/ 16 black

Вариант 12 – изменение шести компонент напряжений в одном диапазоне; цвет в VMD 21 cyan2/ 1 red

Варианты 13-24

Структура (557)

Скорость растяжения $\dot{\epsilon}_1$

Вариант 13 – напряжения σ_{xx} и напряжения σ_{xy} ; цвет в VMD 21 cyan2/ 24 blue3

Вариант 14 – анализ ближайших соседей, анализ дислокаций и функция радиального распределения; цвет в VMD 6 green/ 25 violet

Вариант 15 – напряжения σ_{yy} и напряжения σ_{yz} ; цвет в VMD 5 tan/ 27 magneta

Вариант 16 – изменение энергий и анализ изменения структуры в VMD; цвет в VMD 0 blue/ 6 green

Вариант 17 – изменение шести компонент напряжений в одном диапазоне; цвет в VMD 16 black/ 29 red2

Вариант 18 – напряжения σ_{zz} и напряжения σ_{xz} ; цвет в VMD 32 orange3/ 29 red2

Скорость растяжения $\dot{\epsilon}_2$

Вариант 19 – напряжения σ_{zz} и напряжения σ_{xz} ; цвет в VMD 23 blue2/ 11 purple

Вариант 20 – изменение энергий и анализ изменения структуры в VMD; цвет в VMD 6 green/ 9 pink

Вариант 21 – напряжения σ_{yy} и напряжения σ_{yz} ; цвет в VMD 16 black / 27 magneta

Вариант 22 – изменение шести компонент напряжений в одном диапазоне; цвет в VMD 12 lime/ 16 black

Вариант 23 – анализ ближайших соседей, анализ дислокаций и функция радиального распределения; цвет в VMD 0 blue/ 15 iceblue

Вариант 24 – напряжения σ_{xx} и напряжения σ_{xy} ; цвет в VMD 0 blue/ 21 cyan2

Использованная литература:

1. К.А. Букреева, Р.И. Бабичева, А.Б. Султангужина, С.В. Дмитриев, К. Zhou, Р.Р. Мулюков. ФТТ. 56(6) 1112 (2014).

2. R.I. Babicheva, K.A. Bukreeva, S.V. Dmitriev, K. Zhou, R.R. Mulyukov. *Comp. Meth. Sci. Technol.* 19, 3, 127 (2013).
3. К.А. Букреева, Р.И. Бабичева, С.В. Дмитриев, К. Zhou, Р.Р. Мулюков. *ФТТ.* 55, 9, 1847 (2013).
4. К.А. Букреева, Р.И. Бабичева, С.В. Дмитриев, К. Zhou, Р.Р. Мулюков. *Письма в ЖЭТФ* 98, 2, 100 (2013)
5. G.P. Purja Pun, Y. Mishin. *Phil. Mag.* 89, 3245 (2009).