

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 существование 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).

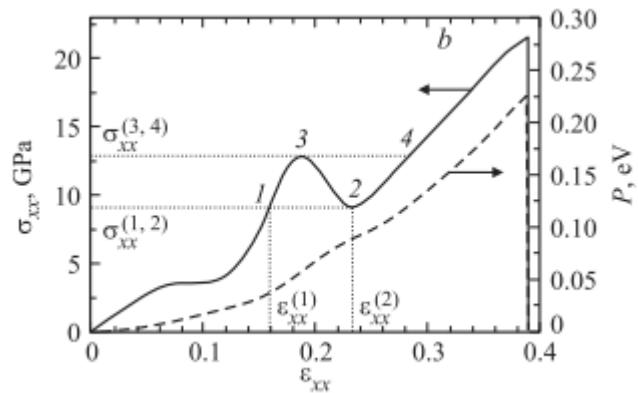


Рис. 1. Зависимость растягивающего напряжения σ_{xx} (сплошная линия) и потенциальной энергии на атом P (штриховая линия) от степени деформации ε_{xx} нанопленки из сплава NiAl при 0 К [10]. Кривые $P(\varepsilon)$ имеют область выпуклости вверх в интервале $\varepsilon_{xx}(1) < \varepsilon_{xx} < \varepsilon_{xx}(2)$, 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 $\sigma(\epsilon)$ с отрицательным наклоном означает отрицательность константы упругости $E = d\sigma/d\epsilon$, 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 $a = 2.8712$ Å. Моделирование одноосного растяжения будет проводится 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 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.

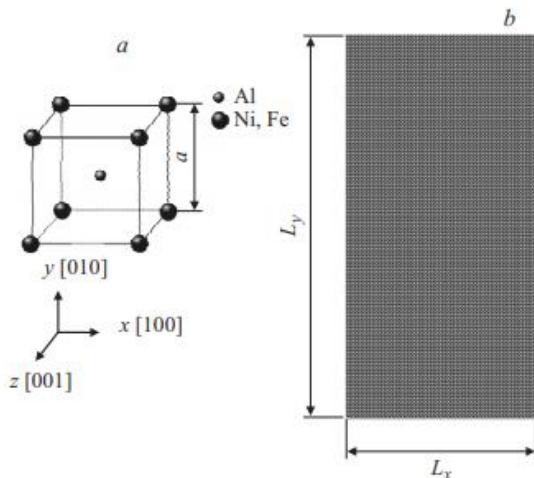


Рис. 2. а) Элементарная ячейка интерметаллидного сплава со сверхструктурой B2 на основе ОЦК-решетки с параметром решетки a . б) Расчетная ячейка нанопленки сплава NiAl

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 xy .

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).