

Лабораторная работа №4.

Механические свойства нановолокон

Цель работы: Исследовать механические свойства нановолокна.

Результат представить в отчете. Обязательно наличие программного кода и графиков.

Теоретическая часть

Механические свойства нановолокон

Нановолокно - это объект, два из его характерных размеров которого лежат в нано-диапазоне (1-100 нм) и существенно меньше третьего размера. К классу нановолокон относят такие нанообъекты, как нанотрубки, нанопроволоки, нановискеры (наноусы) и наностержни. Промышленный критерий для определения нановолокон: нановолокнами считаются волокна с диаметром < 500 нм. Интерес к нановолокнам вызван тем, что механические свойства материалов, такие как предел прочности, прочность на разрыв, на изгиб и на сжатие, модули упругости возрастают при уменьшении диаметра волокон и достигают теоретического предела при достижении наноуровня. Это связано, с одной стороны, со снижением концентрации протяженных дефектов в нановолокне (за счет уменьшения вероятности локализации и последующей сегрегации нескольких точечных дефектов в области, сравнимой с диаметром нановолокна), а с другой стороны, с изменением физических свойств самого материала нановолокна за счет вклада поверхности. Этот эффект справедлив для любых наноматериалов, поскольку поверхность любого материала представляет собой особое двумерно упорядоченное состояние. В случае же полимерных нановолокон размерный эффект может проявляться и в объемных свойствах в результате дополнительного взаимодействия между молекулами полимера, вызванного их ориентацией, когда диаметра волокна становится сопоставим с длиной молекулы. Известно, что прочность промышленных микронных волокон карбида кремния возрастает в

3-4 раза при уменьшении их диаметра в 1,5-2 раза. Экстраполяция этих данных в область диаметров 1 мкм дает увеличение их прочности еще в несколько раз. Поэтому снижение диаметра волокон до субмикронного уровня позволяет повысить их прочность на порядок и более. Однако этот рост прочности еще не является наноразмерным эффектом, но является следствием снижения концентрации объемных дефектов.

Помимо диаметра волокон важным в технологическом смысле параметром является длина волокон, или отношение длины к диаметру волокон. В ряде случаев к НВ относят объекты, у которых это отношение составляет от нескольких десятков до нескольких сотен раз.

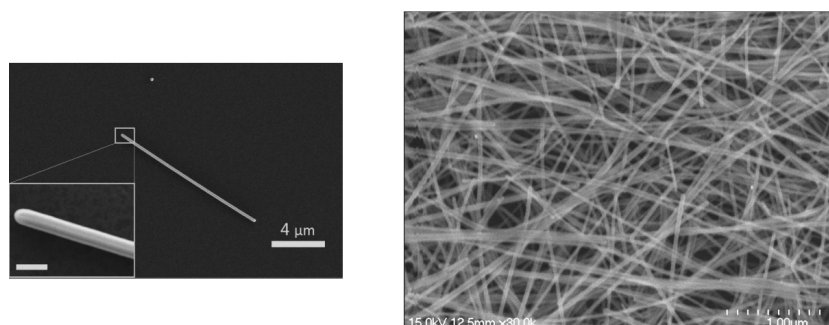


Рис. 1: Одиночная серебряная нанопроволока. Система серебряных нанопроволок.

Металлические нановолокна/нанопроволоки представляют большой интерес благодаря своим уникальным физическим и механическим свойствам. Важной задачей является изучение поведения различных нановолокон при одноосном растяжении. Было показано, что разрушение при растяжении может быть вызвано различными факторами, например, наличием дефектов, размером структуры и др. При этом экспериментальное исследование таких наноразмерных объектов затруднено и многие задачи могут быть решены с помощью метода молекулярной динамики (МД). Данный метод позволяет изучить изменение структуры нановолокна на атомном уровне при различных степенях нагружения, температурах, исследовав влияние кристаллической структуры на механизмы деформирования.

Например, в работе [Phys. Chem. Chem. Phys., 2014,16, 24716-24726] исследуется влияние вакансий в нанопроволоке золота при одноосном растяжении. На рис. 2 показан пример нанопроволоки из золота двух размеров I ($3a$, $3a$, $9a$) и II ($9a$, $9a$, $27a$), где $a=0.408$ нм обозначает постоянную решетки для золота.

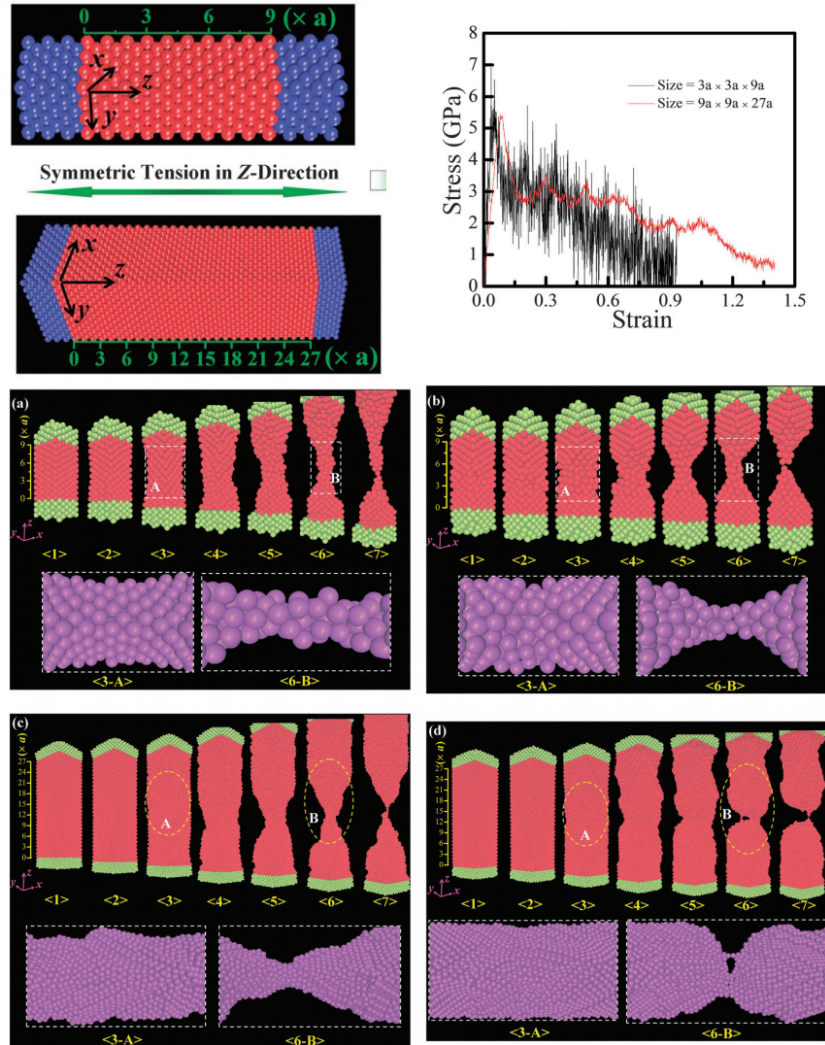


Рис. 2: Схематическое изображение модели в методе МД. (а) Нанопроволока золота двух размеров ($3a$, $3a$, $9a$) и ($9a$, $9a$, $27a$) соответственно (a обозначает постоянную решетки, $0,408$ нм для золота). (б) Кривая напряжение-деформация. (в) Процесс разрыва для проволок двух размеров с разным содержанием вакансий. [Phys. Chem. Chem. Phys., 2014,16, 24716-24726]

Из кривой напряжение-деформация для бездефектной нанопроволоки видно, что в начальный момент времени наблюдается линейный участок: кривая идет вверх линейно. Затем происходит резкое падение напряжений, что обозначает смену механизма деформирования и переход к пластическому течению. Как видно, на кривой наблюдаются временные

увеличения напряжения (малые пики), что свидетельствует о том, что происходили структурные перестройки, которые позволяли нанопроволоке растягиваться и дальше. По достижении критического значения деформации происходит разрыв нанопроволоки. Для нанопроволоки меньшего размера это 0.9, для нанопроволоки большего размера это 1.3. Далее рассматривается влияние не только размера, но и наличия вакансий в центральной части нанопроволоки. Верхние рисунки соответствуют меньшей нанопроволоке с количеством вакансий 4% (слева) и 35% (справа), нижние - большей нанопроволоке с 0.6% вакансий (слева) и 30% вакансий (справа). Из рисунка видно как постепенно происходит разрыв нанопроволоки при разных условиях. Для размера I разрыв происходит в средней области, в то время как для размера II разрыв происходит ближе к концам. Влияние вакансий более очевидно для размера II, чем для размера I. Деформационные механизмы также были разные: золотая нанопроволока I демонстрирует неупорядоченный класстер в месте утончения, где и происходит разрыв, в то время как золотая нанопроволока II демонстрировала упорядоченный разрыв посредством проскальзывания. Механическая прочность золотой нанопроволоки уменьшается с увеличением размера.

Важное влияние может оказать кристаллическая решетка нановолокна: вдоль каких именно плоскостей было вырезано или выращено нановолокно. Например, в работе [McDowell, M. T., Leach, A. M., Gall, K. (2008). *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 16(4), 045003.] было показано изменение модуля Юнга при растяжении серебряного нановолокна в зависимости от ориентации кристаллических плоскостей. Пример структуры и зависимость модуля Юнга от толщины нановолокна показаны на рис. 3.

Было показано, что значения модуля Юнга для нанопроволоки с аксиальной ориентацией 110 увеличивается с уменьшением толщины поперечного сечения, в то время как для нанопроволоки с аксиальной ориентацией 100 модуль Юнга уменьшается с уменьшением поперечного сечения. Такое поведение можно объяснить тем, что деформация в сердцевине нановолокна и на его поверхности происходит по разному. Для проволоки с аксиальной ориентацией 100 упругость поверхности играет большую роль при приложении изгиба чем при приложении растяжения. Для проволоки с аксиальной ориентацией 110 трудно разделить линейную упругую деформацию на поверхности и нелинейность деформации сердцевины нанопроволоки.

Таким образом, изучение и анализ деформационного поведения нанопроволок представляет качественно иную задачу, чем изучение деформируемости объемных кристаллов. Переход к нано размеру приводит к изменению механизмов деформирования и сильной их зависимости от

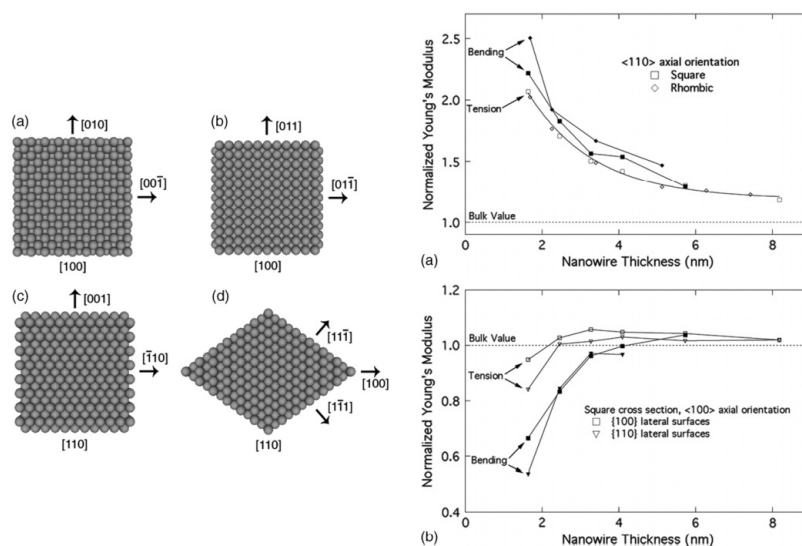


Рис. 3: Схематическое изображение модели в методе МД. (а) Два типа кристалла серебра. (б) Зависимость модуля Юнга от размера нанопроволоки. [McDowell, M. T., Leach, A. M., Gall, K. (2008). Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 16(4), 045003.]

длины и толщины нанопроволоки.

В рамках данной лабораторной работы будет проведено молекулярно-динамическое моделирование растяжения нановолокна никеля, а также проанализирована кривая напряжение-деформация и структурные характеристики.

Практическая часть

Задание 1. Создание структуры нановолокна ГЦК кристалла Ni.

1. Создайте на диске D папку [Nanowire](#) и скачайте в нее файлы [in.fcc](#) и [in.tensile](#).

2. Откройте файл [in.fcc](#) с помощью [Notepad++](#) и задайте размер кристалла по вариантам (см. видео инструкции). Сохраните файл.

3. На диске C скопируйте файл [lmp_serial](#) и файл с потенциалом (см. видео инструкции), положите эти файлы в папку [Nanowire](#).

4. Откройте командную строку и перейдите в папку [Nanowire](#). С помощью команды [lmp_serial -in in.fcc](#) создайте структуру нановолокна. Программа отрелаксирует структуру.

3. В программе VMD откройте файл [Ni_nanowire.lammpstrj](#). Задайте следующие параметры:

Таблица 1: Варианты к заданию 1.

Вариант	Размер по x	Размер по y и z	Потенциал
4	45	3	Ni_u3.eam
5	60	4	Ag_u3.eam
6	70	5	Cu_smf7.eam
7	80	4	Au_u3.eam
8	50	5	Pt_u3.eam
9	60	3	Cu_u3.eam
10	55	4	Cu_u6.eam
11	60	5	Cu_smf7.eam
12	70	5	Cu_u6.eam
13	58	5	Al_jnp.eam
14	65	4	Pt_u3.eam
15	75	4	Ag_u3.eam
16	60	3	Au_u3.eam
17	77	3	Ni_u3.eam
18	55	5	Ni_smf7.eam
19	50	4	Ni_smf7.eam
20	55	4	Ni_u3.eam
21	62	5	Ag_u3.eam
22	65	3	Cu_smf7.eam
23	75	4	Au_u3.eam
24	70	4	Pt_u3.eam
25	80	5	Cu_u3.eam
26	68	4	Cu_u6.eam
27	75	4	Cu_smf7.eam

- В меню [Display](#) выберем тип изображения [Orthographic](#);
- В меню [Graphic, Colors: Display-Background-8 white](#) для того, чтобы задать белый фон;

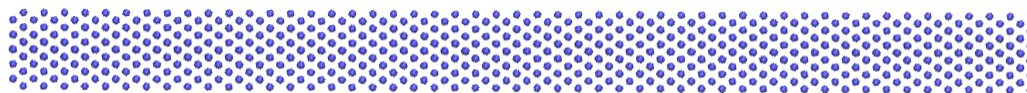


Рис. 4: Структура нановолокна.

- В меню [Graphic, Representation: Coloring Method - ResID](#) и [Drawing Method - CPK](#);

Сохраните отрендеризованную структуру для отчета. Пример показан на рис. 4.

4. В командной строке запустите следующую программу, которая осуществит растяжение нановолокна. Запуск командой [lmp_serial -in in.tensile](#). Программа начнет выполнять растяжение нановолокна.

5. Анализ полученных результатов.

Рассмотрим полученные в результате выполнения программы результаты. Файл [tension.txt](#) содержит следующие данные: время счета t (1 столбец); величина деформации ε (2 столбец), величина компоненты напряжений σ_{xx} (3 столбец), величина компоненты напряжений σ_{yy} (4 столбец), величина компоненты напряжений σ_{zz} (5 столбец). Расчетному времени t соответствует некоторая деформация ε . То есть, если необходимо посмотреть структуру при деформации $\varepsilon=0.019$ в программе VMD необходимо выбрать шаг по времени 1900. Следует отметить, что в VMD этому соответствует шаг 19, поскольку запись осуществляется раз в 100 шагов. Пояснения даны на рис. 5 (соответствие деформации и времени выделено красной рамкой).

- Используя файл [tension.txt](#) построить график зависимости трех компонент напряжения (3, 4, 5 столбцы) от деформации (2 столбец). Пример показан на рис. 6. Добавьте график в отчет.
- В программе VMD откройте файл [Ni_tensile.lammpstrj](#). Задайте параметры для изображения как в задании 3. Сохраните изображение структуры при $t=100$ ($\varepsilon=0.01$ (1%)); $t=10000$ ($\varepsilon=0.1$ (10%)); $t=11300$ ($\varepsilon=0.113$ (11.3%)); а также в конечный момент времени. На рис. 6 эти точки отмечены на кривой напряжение-деформация. Пример показан на рис. 7.

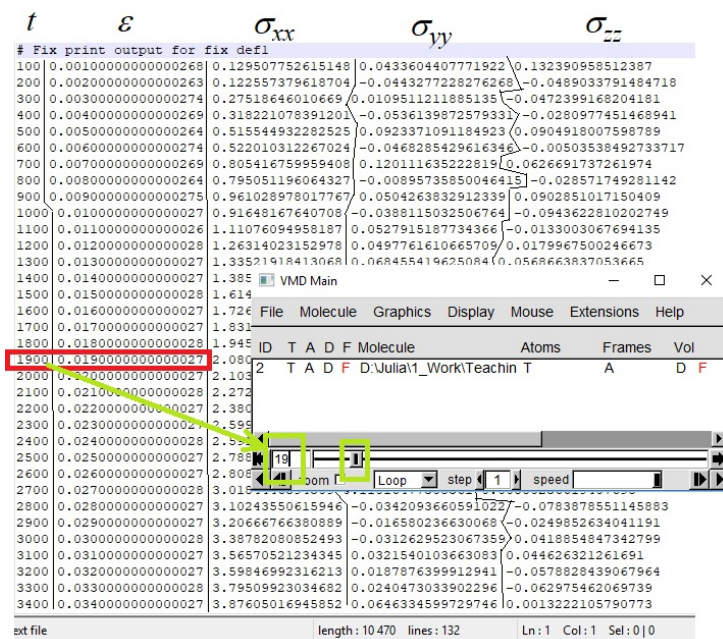


Рис. 5: Файл [tension.txt](#).

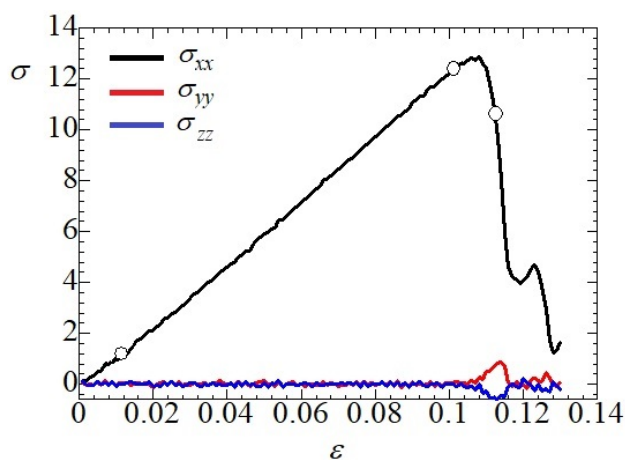


Рис. 6: График зависимости напряжения от деформации.

- Откройте в программе OVITO файлы, содержащие сведения о потенциальной энергии каждого атома ([en.*.dump](#)) (шаг 1). Задайте [Color coding](#) (шаг 2). Для представления в отчете выберите изображение [Perspective](#) и далее рассматривайте именно его, а не все 4 вида проекций. Пример показан на рис. 8. Как и в VMD, в программе OVITO структура показана каждые 100 шагов, следовательно

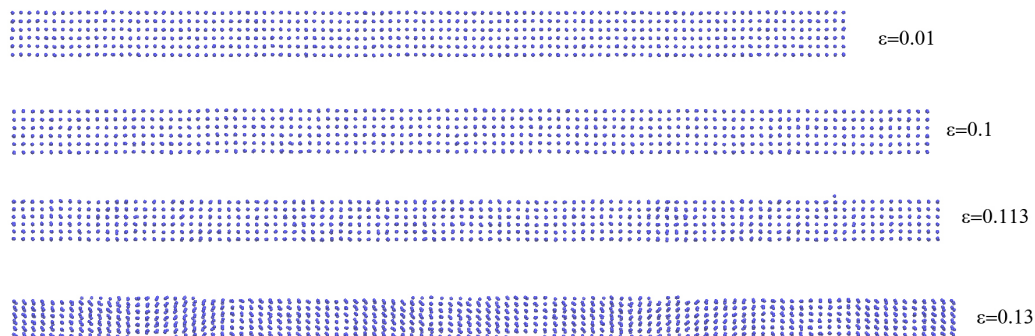


Рис. 7: Структура нановолокна.

если $t=10000$ в файле [tension.txt](#), в OVITO это 100. Представьте в отчете изображение структуры при $t=0$; $t=10000$, $t=11300$ и в конечный момент времени. Шкалу изменения энергии также необходимо представить на рисунке. Пример показан на рис. 9.

- Откройте в программе OVITO файлы, содержащие сведения о распределении напряжений на атомах ([stress*.dump](#)). Измените компоненту напряжений (шаг 1 на рис. 10) на ε_{xx} ([c_mycompress\[1\]](#)), поскольку файл [stress*.dump](#) содержит все шесть компонент напряжений и по умолчанию открывает последнюю компоненту. Далее измените цветовую палитру. В примере, показанном на рис. 10 выбран тип представления [Magma](#) (шаг 2 на рис. 10). Вы можете выбрать любой, отличающийся от того, что был использован при изображении энергии. Обязательно обновите диапазон значений напряжений, потому, что по умолчанию он рисует диапазон последней компоненты. Для обновления нажмите [Adjust range](#) (шаг 3 на рис. 10). Представьте в отчете изображение структуры при $t=0$; $t=5000$, $t=7500$, $t=10000$, $t=11300$ и в конечный момент времени. Шкалу изменения энергии также необходимо представить на рисунке. Пример показан на рис. 11.

6. Вывод.

Напишите вывод на основе анализа полученных результатов. В выводе должна быть описана кривая нагружение-деформация. Сделано заключение о том, что произошло с материалом (произошло ли разрушение? наступил ли момент пластического течения?). Вывод должен содержать ответы на вопросы: как связано распределение потенциальной энергии на атом и участка на деформационной кривой? Как были определены характерные точки в которых построено изображение структуры?

Что происходит с распределением напряжений? Что произошло со структурой в момент времени $t=10000$, а что в моменты $t=11300$ и $t=13000$?

Контрольные вопросы

1. Что такое нановолокно?
2. В чем преимущества и недостатки нановолокон по сравнению с объемными материалами?
3. Почему меняются механизмы деформации при растяжении нановолокон в отличие от объемного материала?
4. Какие факторы могут влиять на процесс разрыва нановолокон?
5. Каково влияние размера на деформационное поведение нановолокон?

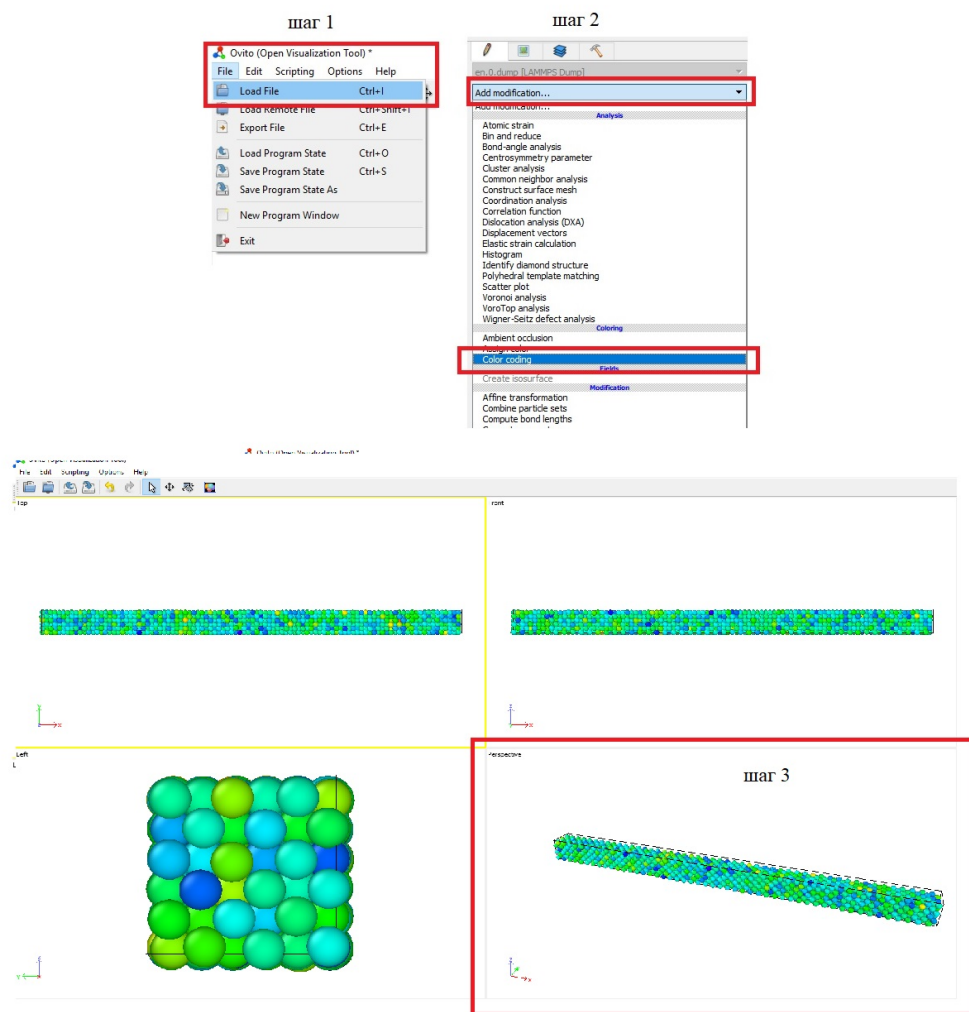


Рис. 8: Использование OVITO.

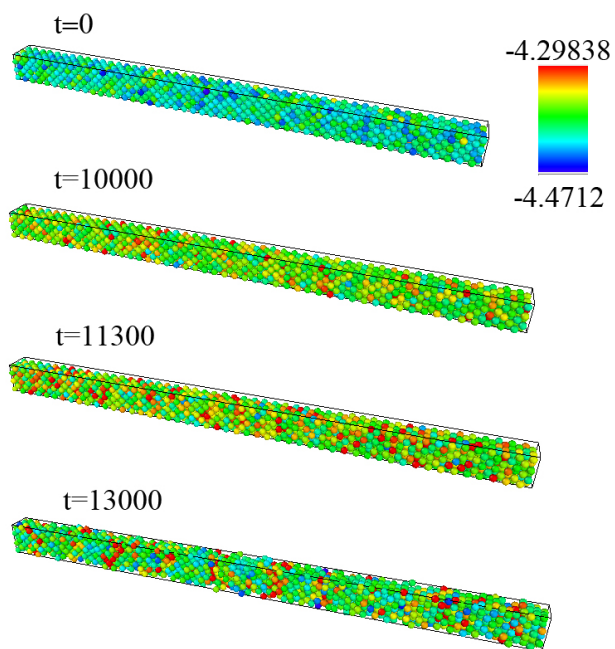


Рис. 9: Распределение потенциальной энергии на атом.

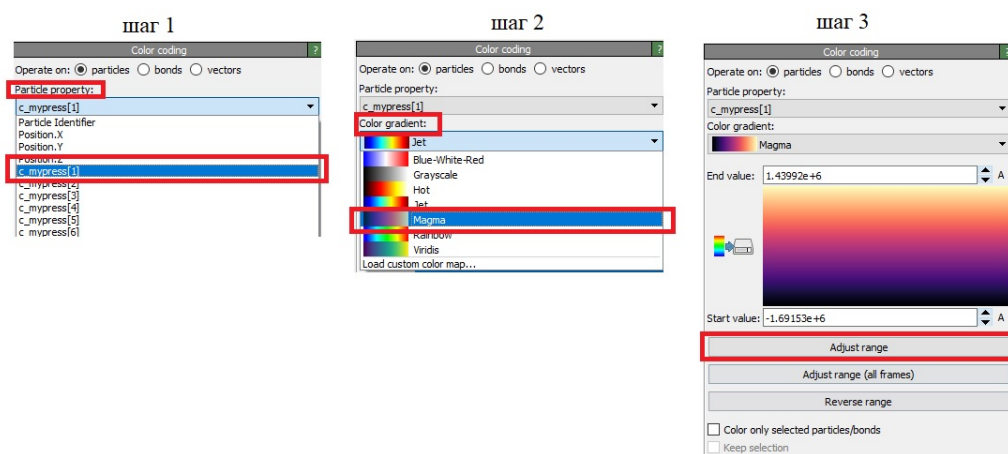


Рис. 10: Использование OVITO.

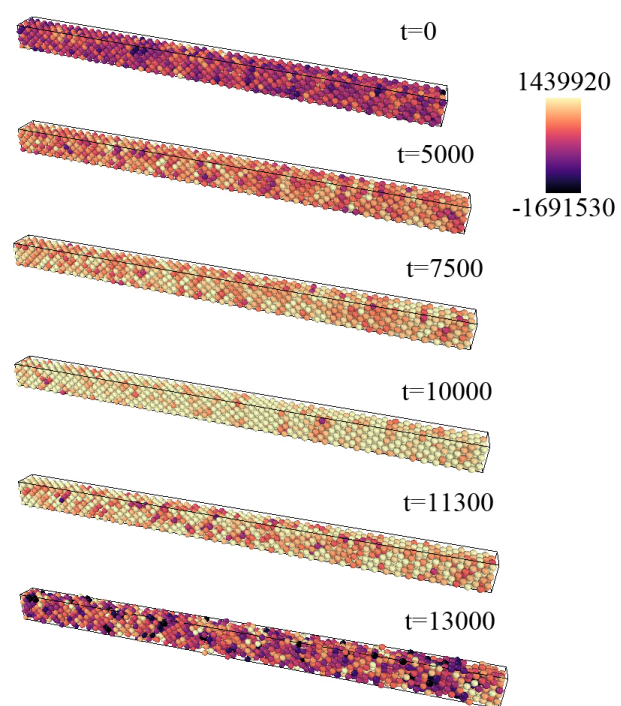


Рис. 11: Распределение напряжений ε_{xx} в разные моменты времени.