

Всестороннее растяжение сферических нанокристаллов молибдена

В. В. Огородников

Представлены результаты компьютерного моделирования всестороннего растяжения сферических нанокристаллов молибдена диаметром 10,1 нм и с числом атомов 34 621. Исследованы атомные механизмы зарождения и развития трещин в ОЦК металлах в условиях сдерживания механизмов пластической деформации в широком интервале температур — от 0 до 2800 К.

Ключевые слова: нанокристаллы, молибден, компьютерное моделирование, всестороннее растяжение, разрушение, атомные механизмы деформации.

Введение

Данное исследование направлено на изучение особенностей деформации ОЦК металлов в условиях сдерживания механизмов пластической деформации. Такие условия возникают при всестороннем растяжении сферического тела с радиальной симметрией приложенных сил нагрузки. Если бы тело представляло собой однородный континуум, разрушение происходило бы только под действием нормальных напряжений. Но в случае кристаллов, даже с высокосимметричной структурой, которую имеют тугоплавкие ОЦК металлы, радиально-симметричные силы вызывают появление как нормальных, так и тангенциальных напряжений в силу зависимости упругих свойств кристалла от кристаллографических направлений. Для данного эксперимента важно, что нормальные силы, по крайней мере, на начальной стадии деформации, будут доминирующими, в отличие от случая линейного растяжения. Это дает возможность проследить межатомные взаимодействия и деформационные свойства нанокристаллов ОЦК металлов при разных механических напряжениях. В нашем эксперименте было важно сопоставить деформационные механизмы при разных соотношениях нормальных и касательных напряжений.

Молибден является типичным представителем переходных ОЦК металлов, которые характеризуются высокой температурой плавления и имеют большое техническое значение. Он входит в состав наноструктурных материалов, применяемых и разрабатываемых. Поэтому изучение свойств молибдена и его соединений в наноструктурном состоянии является важной задачей. В данной работе поставлен ряд компьютерных экспериментов по всестороннему растяжению молибденовых наносфер с целью изучения поведения отдельных атомов и структурных элементов в условиях, когда нормально приложенные силы вызывают появление касательных напряжений и деформаций сдвига. Это даст возможность, с одной стороны, дополнить проверку модели, которая была применена для линейного растяжения, а с другой — изучить поведение отдельных атомов и структурных элементов в новых условиях, в других упругих полях. Таким образом, цель настоящей работы — получить всестороннюю информацию

о механических свойствах кристаллической решетки ОЦК металлов на атомном уровне при разных механических воздействиях.

Условия эксперимента

Кроме механических параметров процесса, большое значение имеют также температура и размер нанокристалла. Поэтому температуру варьировали в широких пределах: от 0 К до температуры вблизи точки плавления ($T_{пл} = 2890$ К). Изменяли также размер наносфера. Основные эксперименты проводили на таких наносферах, в которых число атомов в объеме значительно превышает число атомов на поверхности. Это делалось для того, чтобы получить данные для нанокристаллов, свойства которых определяются не только поверхностью, но и в значительной мере объемом. Один вариант исследований был проведен на шаре диаметром $D_0 = 7,52$ нм с числом атомов $N = 14\ 331$, все другие — на шарах диаметром 10,1 нм с числом атомов 34 621 (отношение числа объемных атомов к поверхностным $\approx 5 : 1$).

При застройке решетки атомами был задан радиус ограничения R_s . Конечно, атомы, которые попали в сферу радиуса R_s , образовывали вписанный многогранник. Таким образом, наносфер задавался с точностью до кристаллографической огранки. Растягивание кристалла осуществляли принудительным смещением поверхностных атомов (оболочки) в радиальных направлениях с отдалением от центра шара с постоянной скоростью. Для атомов оболочки не рассчитывали взаимодействия как между собой, так и с атомами сердцевин. Но для атомов сердцевин взаимодействия с поверхностными атомами учитывали. В начальной структуре для всех атомов, объемных и поверхностных, были заданы хаотические смещения атомов из узлов решетки в соответствии с требуемой температурой. Для поверхностных атомов процедуру хаотических смещений повторяли на каждой итерации для имитации тепловых колебаний и действий этих колебаний на сердцевинную часть. Это делалось для того, чтобы избежать подстраивания атомов сердцевин под симметричную структуру оболочки в ходе процесса при температуре выше 0 К (поддержание хаотичности). Для атомов сердцевин эти начальные смещения задавались однократно, так как дальнейшее хаотическое движение автоматически поддерживалось межатомными взаимодействиями и периодической термализацией согласно заданной температуре. Температуру T задавали путем сообщения атомам случайных смещений со скоростями v_i в произвольных направлениях таким образом, чтобы суммарная кинетическая энергия достигала значения $\sum mv_i^2/2 = 3kT/2$.

Потенциал межатомных взаимодействий

Межатомные взаимодействия описывали с помощью универсального энергетического уравнения Роуза [1], которое было модифицировано в парный потенциал [2—4]

$$\varphi(\alpha) = \varphi_0(1 + \alpha)\exp(-\alpha), \quad (1)$$

где φ_0 — энергия диссоциации парной связи; α — скейлинговый параметр,

$$\alpha = b(y - 1) + c(y - 1)^2 + d(y - 1)^3, \quad (2)$$

где $y = r/r_0$ — относительное расстояние между парой взаимодействующих атомов; r_0 — равновесное расстояние согласно потенциалу. Параметр b определяется комбинацией свойств в состоянии равновесия: объемного модуля упругости B , энергии атомизации (сублимации) E_0 и атомного объема V_0 , а именно $b = 3(BV_0/E_0)^{1/2}$. Параметр c определяется коэффициентом Грюнайзена γ или барическим коэффициентом $k_P = dB/dP$ (P — гидростатическое давление) в соответствии с выражениями

$$\gamma = (b - 1)/3 - c/b; \quad k_P = 2\gamma + 5/3. \quad (3)$$

Параметром d задается четвертая производная потенциала, определяющая дальнедействующую составляющую (в данной работе принято $d = b$). Ранее потенциалы вида (1) с параметрами (2), (3) были применены для моделирования деформации и разрушения нанокристаллов хрома, ниобия, бикристаллов Cr—Nb и интерметаллида NiAl [5—16]. Полученные данные показали, что принятые потенциалы дают физически адекватные результаты, которые не противоречат имеющимся экспериментальным и теоретическим данным относительно механизмов процесса, одновременно дополняя их. Важно, что основные из них были подтверждены также расчетами с использованием известного потенциала погруженного атома [17—19].

В данном исследовании параметры потенциала для молибдена были вычислены по формулам (2), (3) с применением справочных характеристик молибдена [20, 21]: энергии атомизации $E = 6,7677$ эВ; периода решетки $L = 0,31474$ нм; модуля объемной упругости $B = 217$ ГПа; коэффициента Грюнайзена $\gamma = 1,67$. Результаты приведены в таблице.

На рис. 1, *a* представлен парный потенциал (1) с параметрами, приведенными в таблице, а на рис. 1, *б* показано хорошее совпадение результата суммирования потенциала по решетке с учетом двух координационных сфер (R_k — радиус ограничения потенциала в таблице)

Параметры парного потенциала (1) для молибдена

Потенциал	b	c	d	ϕ_0 , эВ	r_0 , нм	R_k , нм
Mo—Mo	5,2992	-1,2555	5,2992	-1,0316	0,28383	0,400

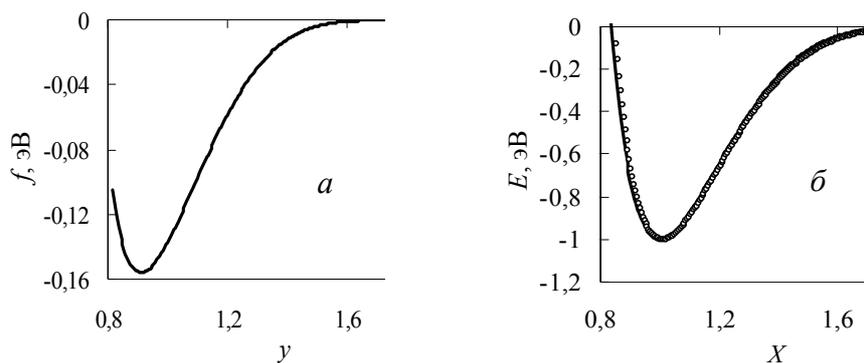


Рис. 1. Парный потенциал для молибдена (*a*) и график энергетического состояния (*б*): точки — суммирование потенциала по решетке; сплошная кривая — универсальное уравнение Роуза (1) с расширенным скейлингом (2) [2—4].

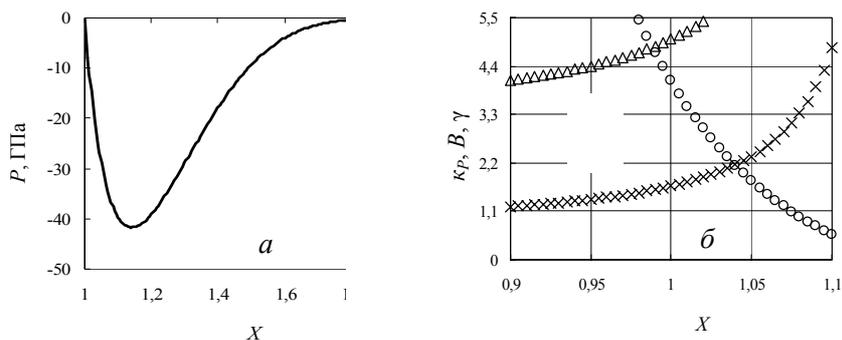


Рис. 2. График барического состояния $P(X)$, отвечающего двум энергетическим зависимостям на рис. 1, \bar{b} (совпадают в данном масштабе) (а) и зависимости барического коэффициента k_p (Δ), модуля объемной упругости B (o) (в безразмерных единицах — BV_a/E_a ; V_a — атомный объем; E_a — энергия атомизации) и коэффициента Грюнайзена γ (x) от $X = (V/V_0)^{1/3}$.

и уравнения состояния Роуза с расширенным скейлингом (2). Барические зависимости $P(X)$, отвечающие энергетическим зависимостям на рис. 1, совпадают и представлены на рис. 2, а одной кривой. Исходя из уравнения $P(X)$, рассчитывали зависимости барического коэффициента k_p , модуля объемной упругости B и коэффициента Грюнайзена γ от приведенных расстояний $X = (V/V_0)^{1/3}$ (рис. 2, б).

Структурные изменения при разных температурах

Растяжение при 0 К

Этот эксперимент проведен со сферой диаметром 7,5 нм и с числом атомов 14 331 (отношение объемных атомов к поверхностным ≈ 2). Скорость растяжения (увеличение диаметра оболочки за одну итерацию) составляла $2 \cdot 10^{-5}$ нм/фс (20 м/с). Начальная структура показана на рис. 3, а. На первом этапе происходит только увеличение расстояний между атомами без нарушений кристаллической структуры (упругое растяжение). Эта чисто упругая деформация достигает большой величины: $\sim 20\%$. Зарождение трещин начинается с появления едва заметной неоднородности в увеличении межплоскостных расстояний. В ходе компьютерного эксперимента можно детально проследить, как на некотором расстоянии от поверхности шара при определенном критическом растяжении две-три соседние плоскости начинают отдаляться друг от друга интенсивнее, чем в других областях. Вскоре возникает структура, показанная на рис. 3, б (растяжение 20,79%). Такой самый начальный акт зарождения трещин невозможно обнаружить в натурном эксперименте. На рис. 3, б видно, что одновременно возникает ряд симметрично расположенных зародышей в плоскостях семейства $\{100\}$. Это свидетельствует о том, что в силу отсутствия тепловых колебаний при 0 К напряжения в кристалле распределяются строго симметрично и достигают максимальной величины на некотором критическом расстоянии от поверхности $R_{кр}$.

Следующие особенности зародышевых трещин заключаются в том, что их продвижение в плоскости залегания ограничено, поскольку они,

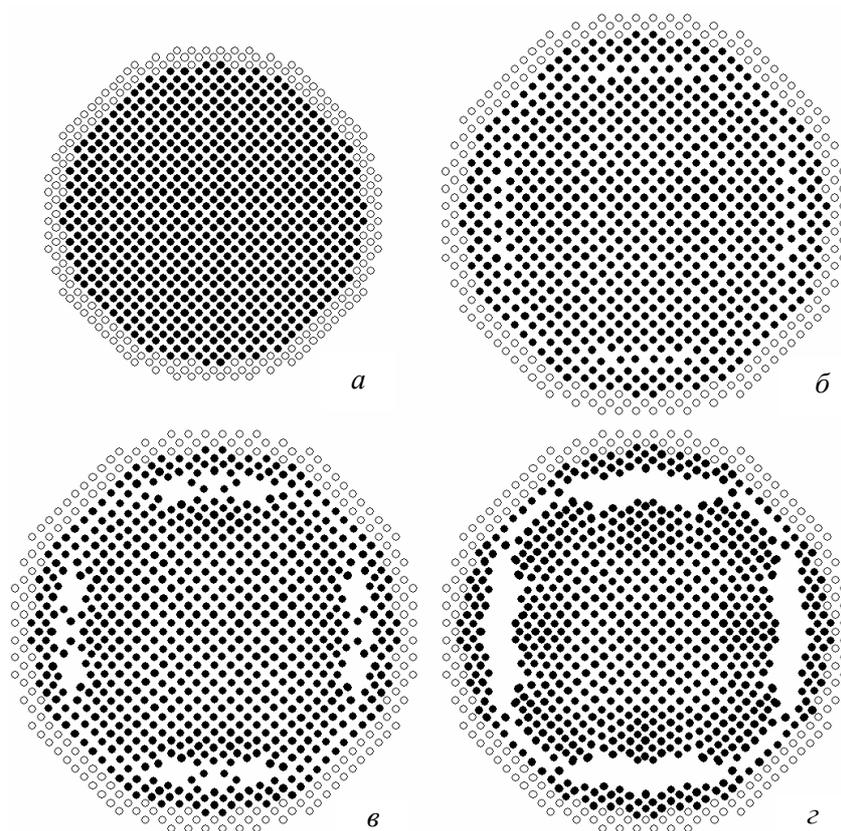


Рис. 3. Растяжение нанокристалла молибдена ($D_0 = 7,5$ нм; $N = 14\,331$) при температуре 0 К. Деформация (%): a — 0; $б$ — 20,79; $в$ — 20,91; $г$ — 21,02. Скорость растяжения — 20 м/с. Светлые кружки — атомы оболочки, подвергаемые принудительному растяжению; темные кружки — свободно релаксирующие атомы сердцевины (те же обозначения на следующих рисунках).

как видно на рисунке, своими краями упираются в плоскости $\{110\}$, которые, в свою очередь, связаны с плоскостями поверхности, то есть с жесткой (растягиваемой, но не разрушаемой) оболочкой. На стыке этих ориентаций, несомненно, возникают не только нормальные, но и сдвиговые напряжения. При этом отсутствие дислокаций и геометрических условий их зарождения не дает возможности развития пластических деформаций. Строение самой трещины необычно. Она представляет собой не пустоту между двумя разъединенными плоскостями, а разреженное пространство, разделенное между тремя соседними плоскостями.

Далее процесс разрушения разворачивается очень быстро. На рис. 3, $в$ (деформация 20,91%) видно, как трещины увеличились, разреженные области превратились в пустоты. В них остаются еще отдельные атомы, которые связаны мостиками взаимодействий между собой и стенками трещин. Форма трещин довольно сложна, но кристаллографически четко обусловлена. Она отражает своеобразный энергетический компромисс между нормальными и тангенциальными напряжениями, которые действуют на трещину.

Уже можно заметить признаки взаимодействия между соседними трещинами. Под влиянием этого взаимодействия (нормальных и сдвиговых напряжений) намечается следующий разрыв между плоскостями $\{110\}$ и объединение всех трещин в одну кольцевую (в объеме — квазисферическую), сформированную между плоскостями $\{100\}$ и $\{110\}$. Результат этого процесса показан на рис. 3, *г* (деформация 21,02%). Сердцевина образца отделилась от оболочки, на которой закрепились остатки плоскостей, отколовшихся от средней части образца.

Таким образом, молекулярно-динамические компьютерные исследования позволили перейти от рисованных атомных схем к прямым визуальным наблюдениям атомных механизмов в динамике.

Растяжение при 30 К

Следующий эксперимент проведен на сфере диаметром 10,1 нм с числом атомов 34 621, что в 2,4 раза больше, чем в предыдущем варианте. Отношение объемных атомов к поверхностным составило $\approx 5 : 1$. Такое количество атомов использовали также во всех последующих экспериментах по растяжению молибденовых наночастиц. При данной температуре применяли две скорости растяжения: 20 и 200 м/с.

Скорость растяжения 20 м/с. В отличие от предыдущего эксперимента при 0 К, атомам, включая атомы оболочки, в начале процесса растяжения были заданы хаотические смещения, которые отвечали заданной температуре 30 К. Для атомов сердцевины на каждой итерации проводилась термализация, то есть коррекция их скоростей таким образом, чтобы суммарная кинетическая энергия точно отвечала заданной температуре. Небольшой тепловой энергии оказалось достаточно для отклонения от полной симметрии атомных смещений и кардинального изменения механизма разрушения. Остановимся на деталях, поскольку именно в них заключен атомный механизм процесса.

Начальная структура показана на рис. 4, *а*. Первый этап во всех экспериментах по растяжению шаров сводился к упругой деформации без повреждений структуры. Изменялась лишь критическая деформация зарождения первой трещины. В этом случае она составляла 15,38%, что меньше, чем в предыдущем варианте, приблизительно на 5%.

Проследим эволюцию отдельных трещин, так как они, взаимодействуя с полями напряжений, могут расти, объединяться или с некоторого момента уменьшаться и исчезать. Первая трещина зародилась в центре образца в виде розетки с четырьмя лепестками на проекции (рис. 4, *б*). В объеме она подобна двум чечевицам, пересекающим друг друга и рассекающим кристалл по плоскостям $\{110\}$. Приблизительно на половине расстояния между центром и поверхностью образца по вертикали заметна еще одна трещина меньшего размера, которая геометрически пока не сформировалась. Трещины окружены полями напряжений: растяжения вдоль направлений $\langle 100 \rangle$ и сжатия — вдоль $\langle 110 \rangle$. Это видно по смещениям атомов вокруг трещин (по разреженным и уплотненным областям). Увеличение деформации лишь на 0,04% приводит к значительному возрастанию размеров двух существующих трещин и появлению новой, третьей, которая образовалась в упругом поле первой (центральной) трещины (рис. 4, *в*, деформация 15,42%). Первые две трещины сформировались по плоскостям $\{110\}$. Третья трещина, в

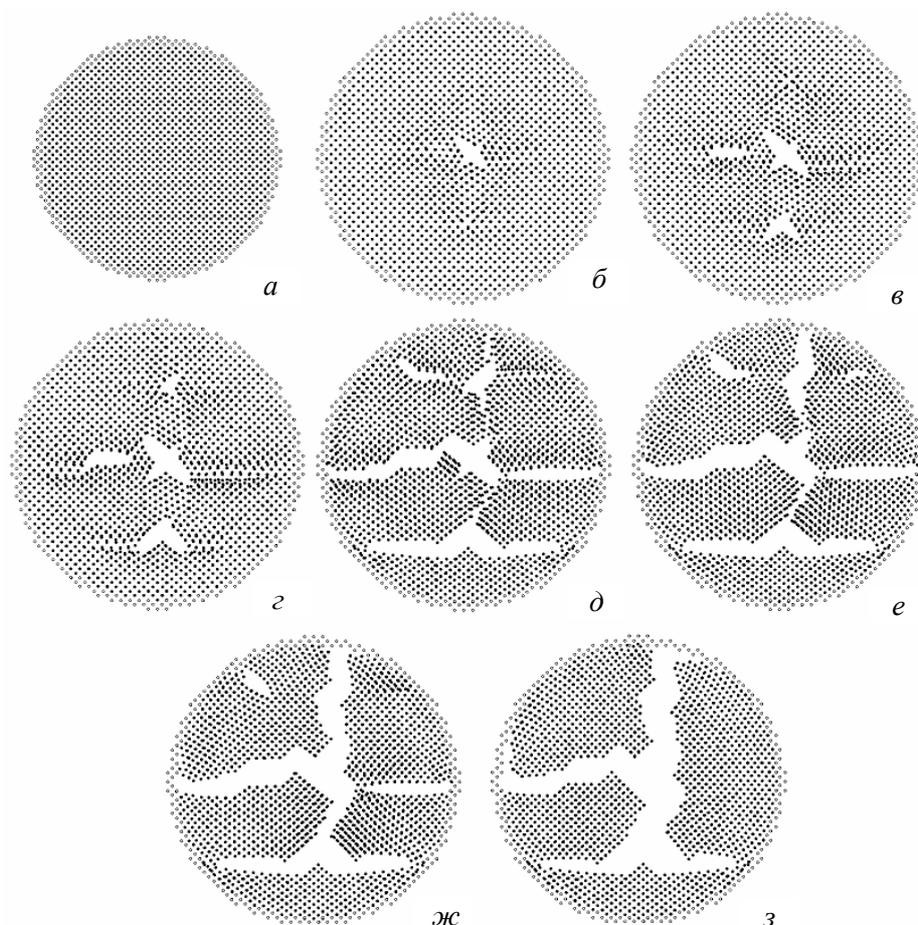


Рис. 4. Растяжение наночастицы молибдена ($D_0 = 10,1\text{нм}$; $N = 34\ 621$) при температуре 30 К. Скорость растяжения — 20 м/с. Деформация (%): *a* — 0; *б* — 15,38; *в* — 15,42; *г* — 15,46; *д* — 15,58; *е* — 15,67; *ж* — 15,75; *з* — 15,91.

отличие от предыдущих, залегла в плоскости (100). Поля напряжений разных знаков вокруг трещин пересекаются и усложняются. Рядом с нормальными напряжениями возникают также касательные. По правую сторону от центральной трещины образуется отросток как зародыш новой трещины, а над ней, почти симметрично относительно второй трещины, формируется еще один.

Увеличение деформации на 0,04% приводит к подрастанию сформированных трещин и зародышей, а также к возникновению новых отростков по краям существующих трещин (рис. 4, *г*, деформация 15,46%). Отростки появляются в полях растяжения и ориентируются по плоскостям {100}. На рис. 4, *д* (деформация 15,58%) показана структура после увеличения деформации еще на 0,12%. Зарождаются новые трещины, все трещины продолжают расти, сливаясь одна с другой. В результате возникают магистральные трещины, которые пересекают весь образец.

С этого момента новые трещины уже не образуются, начинается процесс исчезновения некоторых малых трещин на фоне дальнейшего роста больших (рис. 4, *е*, деформация 15,67%). Последние растут за счет поглощения упругих полей растяжения. Малые трещины в верхней части

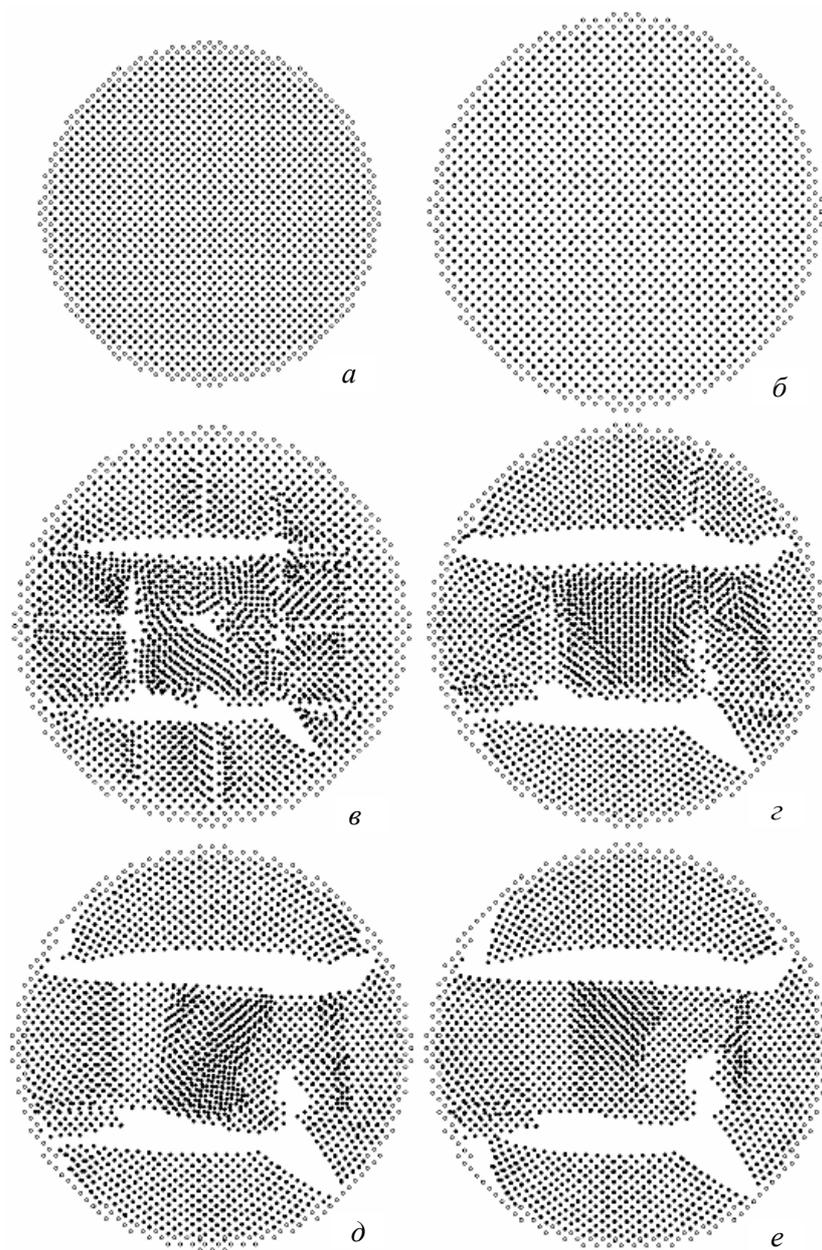


Рис. 5. Растяжение нанопара молибдена ($D_0 = 10,09$ нм; $N = 34\ 621$) при температуре 30 К. Скорость растяжения — 200 м/с. Деформация (%): a — 0; b — 15,25; c — 16,07; d — 16,91; e — 17,74; e — 18,58.

образца укорачиваются и, как видно на рис. 4, *жс* (деформация 15,75%), небольшая трещина, что была справа на рис. 4, *д*, исчезает, а та, что слева, уменьшается и потом тоже исчезает в поле сжимающих напряжений (рис. 4, *з*, деформация 15,91%). Исчезает также довольно большая трещина, которая была в образце справа на рис. 4, *д—жс*, а зарождение ее можно видеть на рис. 4, *в, з*.

На конечной стадии остается одна большая трещина, которая четырьмя рукавами разделяет образец на части. Одновременно почти

полностью исчезают поля напряжений, так как разделенные части имеют достаточно простора для свободного размещения (рис. 4, з).

Скорость растяжения 200 м/с. В следующем эксперименте был заменен лишь один параметр — скорость растяжения. Она была увеличена на порядок. На рис. 5, а представлена начальная структура, а на рис. 5, б — структура в конце упругой деформации, непосредственно перед зарождением трещин. Критическая деформация составляет 15,25%, что на 0,3% ниже, чем в последнем варианте. Скорость и интенсивность растрескивания в этом случае резко увеличились.

Структура на рис. 5, в относится к стадии, когда число трещин максимально. Деформация на этой стадии составляет 16,07%, что выше аналогичной в предыдущем эксперименте на 0,5%. Здесь есть центральная трещина, подобная той, что на рис. 4, б. Но, в отличие от той, она не становится доминирующей, ее окружают довольно большие и маленькие трещины в плоскостях {100} с отростками по плоскостям {110}. Поверхности трещин имеют четкую кристаллографическую огранку. Между трещинами наблюдаются многочисленные сдвиги (пластическая деформация). Структура имеет мозаичный характер. В дальнейшем, маленькие трещины, включая центральную, становятся нестабильными и исчезают, растворяясь в поле нормальных и тангенциальных напряжений. Большие трещины, наоборот, перерастают в магистральные, которые разрушают образец (рис. 5, з, деформация 16,91%). Между ними еще остается большое поле напряжений, которое на следующих этапах уменьшается, а структура становится более правильной (рис. 5, д, е, деформация 17,74—18,58%). Смещение атомов происходит коррелированно, большими массивами, что характерно для низкотемпературных процессов.

Сравнивая два варианта растяжения при 30 К с вариантом при нулевой температуре, видим четкий переход от растрескивания вследствие только нормальных напряжений к смешанному характеру разрушения. Пластические сдвиги наблюдаются в местах наибольшей концентрации напряжений и оказывают содействие раскрытию трещин. Растрескивание снимает большие нормальные напряжения, но высокоскоростная динамика процесса приводит к возникновению в других местах сжимающих напряжений. Некоторые трещины, которые образовались раньше, попадают в поле таких напряжений и захлопываются, как это отмечалось ранее. Несмотря на сдвиги, трещины не затупляются, и характер разрушения остается типично хрупким.

Растяжение при 300 К

Скорость растяжения в этом и последующих экспериментах составляла 200 м/с. В структуре в начале процесса растяжения стали едва заметными тепловые смещения атомов в виде слабой размытости их положений (рис. 6, а). Критическая деформация снова понизилась относительно значений в предыдущих экспериментах (рис. 6, б, деформация 14,48%).

Трещины, которые возникают, в меньшей мере привязаны к плоскостям спайности сравнительно с низкотемпературными случаями (рис. 6, в, деформация 15,30%). Разрушение, как и раньше, носит, в целом, хрупкий характер, но появляются также признаки, характерные для пластичных материалов. Так, трещины менее заострены по краям, поверхности

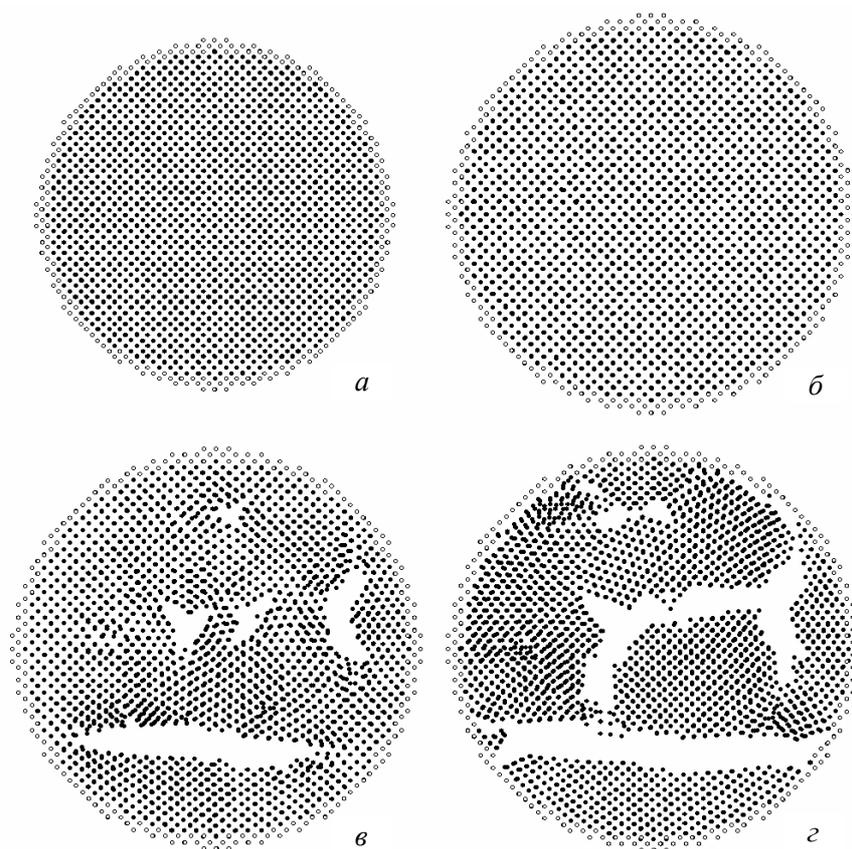


Рис. 6. Растяжение наночара молибдена ($D_0 = 10,09$ нм; $N = 34\ 621$) при температуре 300 К. Скорость растяжения — 200 м/с. Деформация (%): a — 0; $б$ — 14,48; $в$ — 15,30; $г$ — 16,12.

трещин менее четко сформированы, поля напряжений и деформаций более плавно переходят от одного к другому, мозаичность структуры более размыта. Крайняя трещина, а точнее пора, появившаяся в правой части образца на рис. 6, $в$, имеет выраженные округлые формы, что указывает на ее пластично-вязкое происхождение. То же самое можно утверждать о малых трещинах-порах в верхней части на рис. 6, $г$ (деформация 16,12%). Видно, как ряд трещин в центре слился в одну магистральную трещину выгнутой формы, что также указывает на роль пластично-вязких механизмов в ее формировании. Даже почти прямая магистральная трещина внизу рис. 6, $г$ имеет сглаженные изгибы.

Растяжение при 1200 К

Структурные изменения при температуре 1200 К показаны на рис. 7. Разогрев кристалла в начале процесса приводит к хорошо заметным хаотичным смещениям атомов (рис. 7, a). Критическая деформация достигается при растяжении до 13,54% (рис. 7, $б$), продолжая тенденцию к небольшому снижению этой величины с ростом температуры. Кольцом обведена небольшая пустота — зародыш трещины. Есть и менее заметные места структуры со сниженной плотностью. При увеличении деформации еще на 0,4% весь кристалл усеивается трещинами (рис. 7, $в$, деформа-

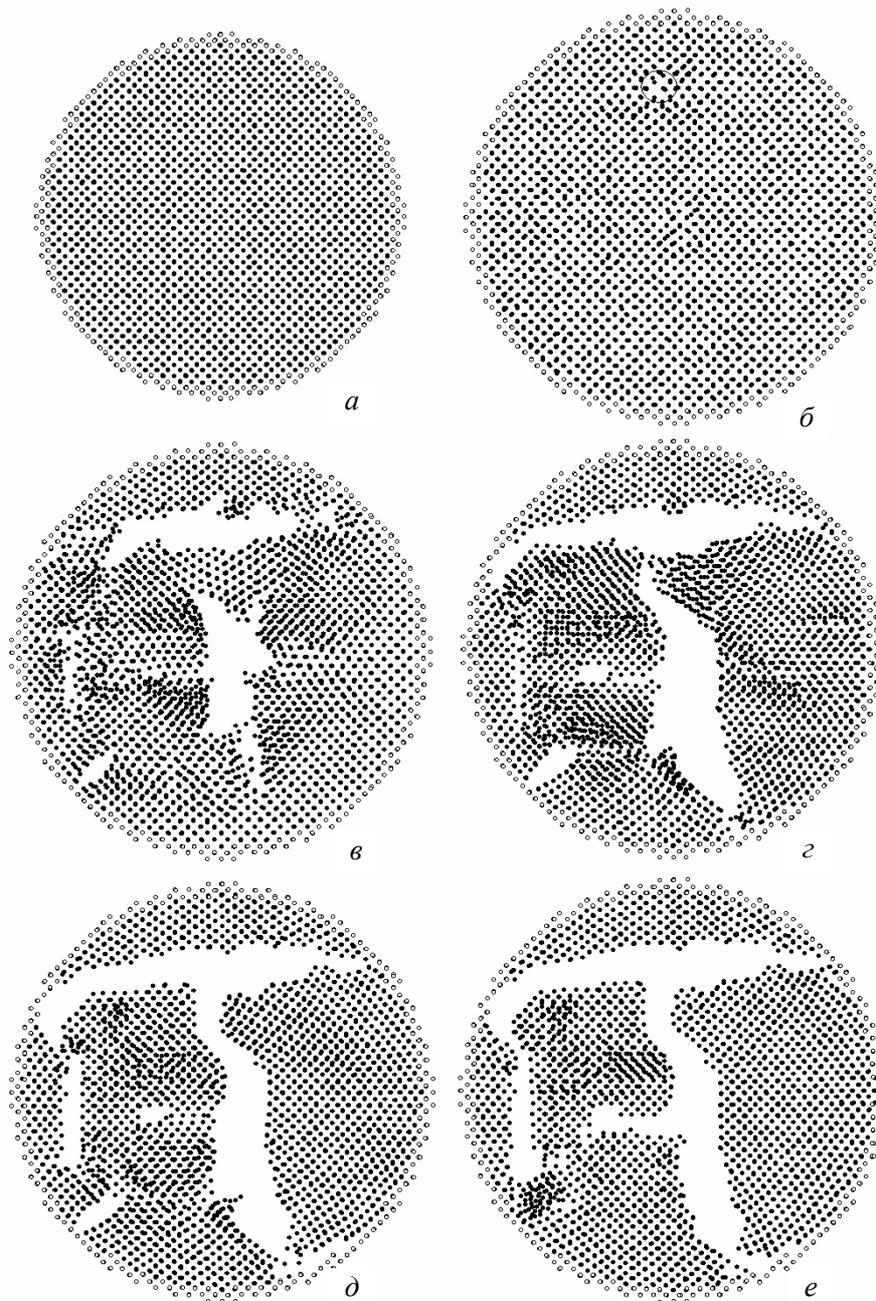


Рис. 7. Растяжение наносфера молибдена ($D_0 = 10,1$ нм; $N = 34\ 621$) при температуре 1200 К. Скорость растяжения — 200 м/с. Деформация (%): a — 0; b — 13,54; $в$ — 13,94; $г$ — 14,35; $д$ — 14,76; e — 15,99.

ция 13,94%). Поля напряжений кристаллографически ориентированы, но не имеют четких границ. Малые трещины расположены в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$. Большие трещины растут преимущественно за счет сдвиговых вязкопластических деформаций и имеют отростки в разных направлениях. Они не раскалывают образец хрупко, как при низких температурах, а более вязко приближаются к поверхности образца (рис. 7, $г$, деформация 14,35%).

Малые трещины находятся некоторое время в состоянии неустойчивого равновесия, они частично растворяются в поле напряжений, частично немного подрастают, частично присоединяются к большим трещинам. На рис. 7 заметны также сдвиговые деформации по плоскостям $\{100\}$, которые могли бы развиваться в трещины, но отмеченное состояние неустойчивого динамического равновесия приводит к обратному процессу, а именно, к их залечиванию (рис. 7, *д*, деформация 14,76%). Неустойчиво и поведение вертикальной трещины, которая появилась на рис. 7, *в* у левого края. Едва образовавшись, она начала исчезать (рис. 7, *з*), но потом при увеличении деформации на 0,4% выросла снова в довольно большую разрушительную трещину (рис. 7, *д*). Образец окончательно раскалывается на фрагменты, и одновременно значительно разряжаются многочисленные поля напряжений, которые присутствовали на двух предыдущих рисунках. Далее идет медленный процесс взаимодействия трещин: большие трещины продолжают укрупняться, а малые (рис. 7, *д—е*) исчезают. Одновременно происходит частичное восстановление равновесной структуры во фрагментах (рис. 7, *е*, деформация 15,99%).

Растяжение при 2400 К

Следующее увеличение температуры до 2400 К способствует дальнейшей размытости положений атомов в решетке, однако кристаллическая структура сохраняется (рис. 8, *а*). Расширение до критического состояния приводит как к увеличению отклонений атомов от положений равновесия, так и к искривлению плоскостей, которые то расходятся, то сходятся, образуя разнообразные неустойчивые дефекты (по наблюдениям промежуточных состояний). Структура при критическом растяжении, которое вновь понизилось до деформации 13,31%, представлена на рис. 8, *б*. В структуре много блуждающих дефектов типа сгущений и разрежений атомной плотности. Структура динамично напряжена.

На рис. 8, *в* (деформация 13,72%) показаны первые две трещины-поры. Верхняя трещина очень невыразительно сформирована и окружена полем интенсивных деформаций и напряжений; она не связана ни с какими кристаллографическими плоскостями и направлениями. Это указывает на ее высокую нестабильность. Нижняя трещина, наоборот, немного похожа на розетки, которые наблюдались в предыдущих структурах при более низких температурах. Выступы чечевицеобразной трещины довольно явным образом сориентированы по плоскостям $\{110\}$, а поля интенсивных деформаций и напряжений — по $\{100\}$.

Далее, как и в предыдущих случаях, идет лавиноподобный процесс разрыва связей с образованием довольно разветвленных, хаотически ориентированных трещин, которые поглотили предыдущие пустоты (рис. 8, *з*, деформация 14,12%). Атомы интенсивно перемещаются в поле напряжений, стремясь понизить энергию кристалла. Трещины, даже довольно большие, существенно трансформируются. Нижний отросток большой трещины залечился (рис. 8, *д*, деформация 14,53%). В то же время трещина справа заметно подросла. Новых всплесков трещинообразования не возникает, тем не менее, трансформация трещин продолжается (рис. 8, *е*, деформация 14,94%). Постепенно большие трещины приближаются своими отростками к поверхности, разделяя образец на обособленные

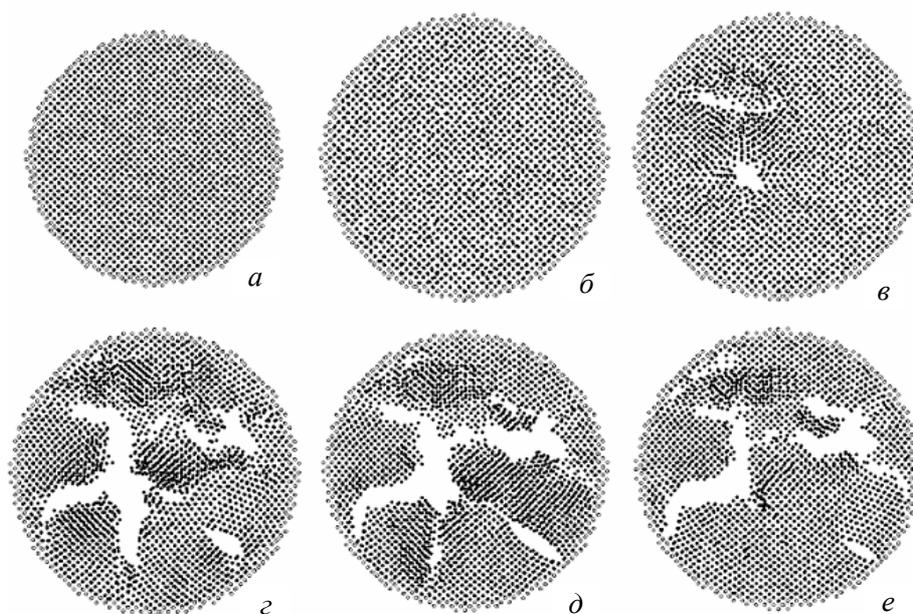


Рис. 8. Растяжение нанопара молибдена ($D_0 = 10,1$ нм; $N = 34\,621$) при температуре 2400 К. Скорость растяжения — 200 м/с. Деформация (%): *a* — 0; *б* — 13,31; *в* — 13,72; *г* — 14,12; *д* — 14,53; *е* — 14,94.

фрагменты, маленькие поры растворяются. Структура между порами постепенно освобождается от напряжений.

Растяжение при 2800 К

При 2800 К молибден приближается к точке плавления, которая составляет 2890 К. Структурное состояние нанокристалла характеризуется еще более интенсивным движением атомов (рис. 9) и активизацией диффузионно-контролируемых процессов. Но до тех пор, пока система не достигнет критической степени растяжения, структурные изменения в ней с образованием стойких дефектов в значительной мере сдерживаются твердой оболочкой, которая, по условиям эксперимента, хотя и расширяется, но не релаксирует. Этим объясняется стойкость структуры нанокристалла при очень высоких температурах вплоть до напряжений, близких к прочности связей. Разрыв связей, который происходит лавинообразно, запускает все механизмы одиночных и кооперативных движений атомов внутри сферы, а также начало процессов испарения и сублимации.

Начальная структура (рис. 9, *a*) характеризуется интенсивными тепловыми колебаниями атомов. С увеличением объема это движение значительно усиливается. Теперь расширение до критической деформации приводит не только к увеличению расстояний между атомами, но и к образованию многочисленных нарушений кристаллической структуры, которые подобны нарушениям в жидкости: отклонений от ближнего порядка, нарушению равномерного распределения атомной плотности, искривлению атомных плоскостей, образованию вакансий (рис. 9, *б*, деформация 13,41%). По достижении предела прочности атомных связей вакансии в отдельных местах объединяются, образуя поры (рис. 9, *в*, дефор-

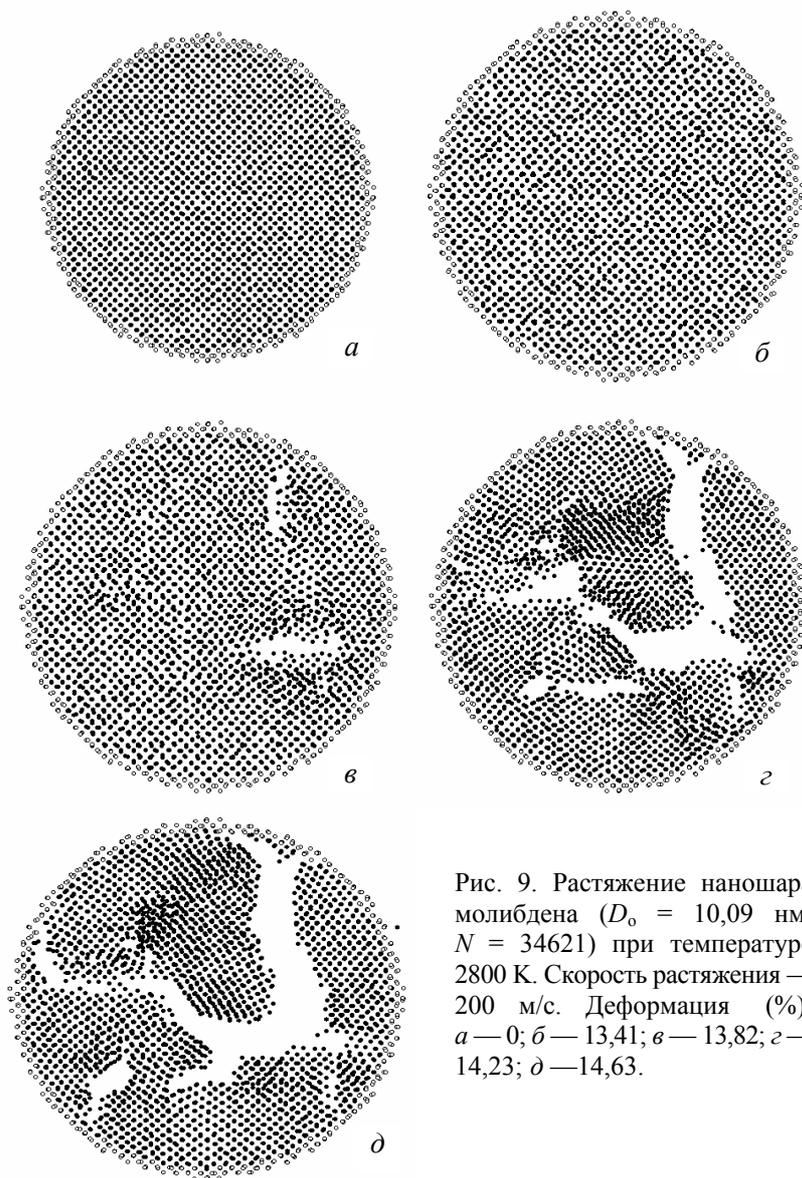


Рис. 9. Растяжение наночастицы молибдена ($D_0 = 10,09$ нм; $N = 34621$) при температуре 2800 К. Скорость растяжения — 200 м/с. Деформация (%): $a — 0$; $б — 13,41$; $в — 13,82$; $г — 14,23$; $д — 14,63$.

мация 13,82%). Они имеют неправильную форму и небольшую тенденцию к ориентированию, вытягиваясь большим размером вдоль плоскостей $\{100\}$. Образование новых пор сопровождается одновременным объединением их с предыдущими. Поэтому небольших пор мало, вместо этого вырастает в основном одна большая пора, которая имеет разветвленный вид (рис. 9, г, деформация 14,23%). Характер порообразования свидетельствует об участии в механизме деформации ряда процессов: высокотемпературной диффузной ползучести, вязкого течения и ограниченных пластических сдвигов. Поры изменяют форму, проявляя в некоторых местах тенденцию к диффузионно-вязкому залечиванию (спеканию). В конце концов, растяжение преобладает, и главная пора пересекает весь образец (рис. 9, д, деформация 14,63%). Кроме того, при температуре возле точки плавления некоторые атомы испаряются, прорываясь сквозь жесткую оболочку.

Выводы

Результаты исследования влияния температуры на процесс разрушения нанокристаллов молибдена при всестороннем растяжении позволяют детально проследить атомную динамику процесса и смену механизмов деформации и разрушения. Повышение температуры от 0 К до предплавильной 2800 К вызывает постепенный переход от чисто хрупкого раскрытия трещин путем отрыва плоскостей друг от друга до диффузионно-контролируемого процесса порообразования путем вязко-пластической деформации. Четко прослеживаются все промежуточные этапы этого перехода с изменением формы трещин, трансформацией их в поры и развитием конкурирующего процесса спекания.

1. *Rose J. H., Smith J. R., and Ferrante J.* Universal features of bonding in metals // *Phys. Rev. B.* — 1983. — **28**, No. 4. — P. 1835—1845.
2. *Огородников В. В.* Аналитический вывод и анализ универсальных уравнений $E(V)$ - и $P(V)$ -состояния твердых тел // *Физика и техника высоких давлений.* — 1994. — **4**, № 4. — С. 15—24.
3. *Огородников В. В.* Изотермические уравнения состояния карбидов // *Карбиды и материалы на их основе.* — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 1995. — С. 4—12.
4. *Ogorodnikov V. V.* Universal state equation of solids and interatomic potentials // *The 15th Internat. Baltic conf. "Engineering Materials & Tribology/BALTMATRIB-2006"*. — Tallinn, Estonia, 2006. — P. 8—10.
5. *Огородников В. В., Малишевский К. В.* Компьютерное моделирование процесса растяжения нанокристалла хрома // *Теория и моделирование электронного строения и свойств тугоплавких соединений, сплавов и металлов.* — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 1997. — С. 127—139.
6. *Огородников В. В., Малишевский К. В.* Компьютерный эксперимент по растяжению бикристалла хрома // *Там же.* — С. 139—146.
7. *Огородников В. В., Малишевский К. В.* Молекулярно-динамическое моделирование растяжения нанокристалла NiAl // *Металлофизика и новейшие технологии.* — 2001. — **23**, № 8. — С. 1029—1039.
8. *Огородников В. В., Малишевский К. В.* Компьютерное исследование атомного механизма деформации и разрушения нанокристаллов ниобия // *Нанокристаллические материалы.* — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 2002. — С. 142—158.
9. *Огородников В. В., Малишевский К. В.* Компьютерное моделирование атомного механизма деформации и разрушения бикристаллов хром—ниобий // *Порошковая металлургия.* — 2003. — № 1/2. — С. 82—91.
10. *Шпак А. П., Огородников В. В., Малишевский К. В., Куницкий Ю. А.* Атомные механизмы деформации и разрушения нанокристаллов хрома // *Металлофизика и новейшие технологии.* — 2003. — **25**, № 8. — С. 1061—1077.
11. *Шпак А. П., Огородников В. В., Малишевский К. В., Куницкий Ю. А.* Атомные механизмы деформации и разрушения нанокристаллов ниобия // *Там же.* — 2003. — **25**, № 9. — С. 16—25.
12. *Шпак А. П., Огородников В. В., Малишевский К. В., Куницкий Ю. А.* Компьютерный эксперимент по деформации нанокристаллов системы хром—ниобий. Сообщение 1. Атомно-структурные перестройки // *Проблемы прочности.* — 2005. — № 1. — С. 5—23.
13. *Шпак А. П., Огородников В. В., Малишевский К. В., Куницкий Ю. А.* Компьютерный эксперимент по деформации нанокристаллов системы хром—ниобий. Сообщение 2. Механические свойства // *Там же.* — 2005. — № 2. — С. 5—15.

14. Огородников В. В. Деформация и разрушение сферических нанокристаллов ОЦК металлов при всестороннем растяжении // Материалы XX Всерос. конф. по численным методам решения задач теории упругости и пластичности. — Кемерово: КГУ СО РАН, 2007.
15. Огородников В. В., Малишевський К. В., Фомін В. М., Головнєв І. Ф. Деформація нанокристалу ніобію абсолютно жорстким клином // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2009. — Вып. 11. — С. 20—36.
16. Огородников В. В., Покропивний В. В., Штерн М. Б. Компьютерное моделирование в материаловедении // Неорганическое материаловедение. Основы науки о материалах. Т. 1. — К.: Наук. думка, 2008. — С. 1092—1145.
17. Котречко С. А., Меишков Ю. Я., Филатов А. В., Овсянников А. В. Моделирование деформирования и разрушения нанокристаллов ОЦК металлов // Металлофизика и новейшие технологии. — 2004. — 26, № 6. — С. 841—850.
18. Котречко С. А., Филатов А. В., Овсянников А. В. Особенности пластической деформации нанокристаллов молибдена // Там же. — 2004. — 26, № 11. — С. 1475—1481.
19. Котречко С. А., Меишков Ю. Я. Предельная прочность. Кристаллы, металлы, конструкции. — К.: Наук. думка, 2008. — 295 с.
20. Физико-химические свойства элементов: (Справ.) / Под ред. Г. В. Самсонова). — К.: Наук. думка, 1965. — 807 с.
21. Физика твердого тела: Энциклопедический словарь / Глав. ред. В. Г. Барьятар). — К.: Наук. думка, 1996. — Т. 1. — 652 с.

Всебічне розтягнення сферичних нанокристалів молибдену

В. В. Огородников

Представлено результати комп'ютерного моделювання всебічного розтягнення сферичних нанокристалів молибдену діаметром 10,1 нм і з числом атомів 34 621. Досліджено атомні механізми зародження і розвитку тріщин в ОЦК металах в умовах стримування механізмів пластичної деформації у широкому інтервалі температур — від 0 до 2800 К.

Ключові слова: нанокристали, молибден, комп'ютерне моделювання, всебічне розтягнення, руйнування, атомні механізми деформації.

Three-D tension of spherical nanocrystals of molybdenum

V. V. Ogorodnikov

The results of computer modeling of a three-D tension of molybdenum spherical nanocrystals by the diameter of a 10.1 nm with the number of atoms 34 621 are presented. The atomic mechanisms of origin and development of cracks in BCC metals are investigated in conditions of a restraint of plastic deformation mechanisms in the wide interval of temperatures — from 0 up to 2800 K.

Keywords: nanocrystals, molybdenum, computer simulation, three-D tension, destruction, atomic mechanisms of deformation.