

УДК 538.913, 539.388

Молекулярно-динамическое исследование особенностей перестройки кристаллической решетки в условиях механоактивируемой диффузии

А.Ю. Никонов^{1,2}, Ив.С. Коноваленко¹, А.И. Дмитриев^{1,2}, С.Г. Псахье^{1,3,4}¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, 634055, Россия² Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, 634050, Россия³ Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, 634050, Россия⁴ Сколковский институт науки и технологий, Сколково, 143025, Россия

С помощью метода молекулярной динамики в работе проведено исследование поведения материала в условиях нагружения, идентичных процессу сварки трением с перемешиванием. Нагружение моделировалось путем задания для выбранной части образца («инструменту») постоянных значений угловой и поступательной скоростей движения. Рассматривались различные варианты сопряжения: два исходно бездефектных кристаллита меди, кристаллы меди и железа и два кристаллита твердых растворов, соответствующих сплаву Д16. Обнаружено, что движение вращающегося инструмента приводит к разрушению кристаллической структуры образца и последующему перемешиванию поверхностных атомов сопряженных кристаллитов. При определенных режимах нагружения кристаллическая решетка после прохождения инструмента восстанавливает регулярный порядок. В работе исследовано влияние дополнительного осциллирующего воздействия, приложенного к движущемуся инструменту. Полученные результаты могут быть использованы для исследования процессов, протекающих в условиях механоактивируемой диффузии.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, механоактивация, перемешивание масс

Molecular dynamics study of lattice rearrangement under mechanically activated diffusion

A.Yu. Nikonov^{1,2}, Iv.S. Konovalenko¹, A.I. Dmitriev^{1,2}, and S.G. Psakhie^{1,3,4}¹ Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, 634055, Russia² National Research Tomsk State University, Tomsk, 634050, Russia³ National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, 634050, Russia⁴ Skolkovo Institute of Science and Technology, Skolkovo, 143025, Russia

Molecular dynamics simulation is performed to study material behavior under loading conditions similar to those of friction stir welding. Loading is simulated by assigning constant rotational and translational velocity to a part of a specimen (“tool”). Different cases of coupling are investigated: two defect-free copper crystallites, copper and iron crystals, and two crystallites of the same solid solution corresponding to D16 alloy. It is found that motion of the rotating tool causes failure of the crystal structure of the specimen and subsequent mixing of surface atoms of the coupled crystallites. The regular lattice order is restored after the passage of the tool under certain loading conditions. The influence of additional oscillating motion applied to the moving tool is investigated. The obtained results can shed light on processes occurring under mechanically activated diffusion.

Keywords: molecular dynamics method, mechanical activation, mass mixing

1. Введение

Представление о том, что поворотная мода деформации является одним из определяющих механизмов развития пластического отклика материала в условиях внешнего нагружения, активно развивается с середины 70-х годов прошлого века и является основополагающим принципом физической мезомеханики материалов

наряду с представлением о нагруженном материале как о нелинейной иерархически организованной системе структурных уровней [1, 2]. В работе [2] отмечается, что именно поворотные моды деформации лежат в основе самосогласования зернограницного скольжения и внутризеренной дислокационной деформации. Роль

поворотной моды при пластической деформации материала и переориентации его кристаллической решетки еще более возрастает в случае, когда механизм внешнего воздействия явно включает в себя элементы ротационного характера.

В последние годы все большую популярность приобретают технологии, позволяющие существенно увеличить скорость процессов, связанных с переносом и перемешиванием масс. В частности, хорошо известен положительный эффект применения шаровых мельниц для ускоренного и однородного перемешивания различных фракций порошковых материалов [3], а также использование нагружения по схеме «сдвиг + сжатие» для получения специальных стесненных условий, приводящих к активации протекания различных физических и химических процессов [4]. Метод сварки трением с перемешиванием является одним из примеров практического применения эффекта ускорения протекания диффузионных процессов за счет их механической активации [5–7]. Использование вращающегося инструмента на стыке двух металлических пластин переводит состояние их кромок в режим пластического течения. Установлено, что нагружение подобного рода позволяют достигать больших по сравнению с объемным деформированием степеней пластической деформации с формированием структурных состояний, характеризующихся высокой плотностью дефектов кристаллической решетки. Исследование механизмов и выявление физических закономерностей формирования структурного состояния и факторов, приводящих к образованию структурных неоднородностей и несплошностей в месте шва в зависимости от параметров нагружения, является важной задачей физики пластичности и прочности.

Несмотря на активное применение технологии сварки трением с перемешиванием для получения высокопрочных неразрывных соединений различных металлов и сплавов многие особенности технологического процесса по-прежнему остаются малоизученными. Трудности теоретического и экспериментального изучения обусловлены большим многообразием, взаимосвязанностью и быстротечностью реализующихся механизмов в месте нагружения. Особенно это актуально при изучении физики процесса на атомном масштабе, когда пространственные и временные масштабы во многом ограничивают набор применяемых экспериментальных методик. В этой связи методы компьютерного моделирования могут быть рассмотрены в качестве эффективного инструмента решения подобного типа задач. При выборе методов численного изучения необходимо учитывать, что механоактивируемые процессы неразрывно связаны с интенсивным формированием несплошностей, генерацией дефектов структуры различного уровня и переносом масс. С этой точки зрения наиболее предпочтительным является использование методов дискретного описания моделируемой среды [8–11].

Таким образом, целью настоящей работы является анализ на атомном масштабе основных закономерностей и механизмов формирования структурного состояния материала, подвергнутого воздействию интенсивной пластической деформации по схеме нагружения, имитирующей условия сварки трением с перемешиванием. Структура работы построена по следующему принципу. Первоначально на атомном уровне исследуются особенности структурных изменений кристаллических решеток двух идентичных ГЦК-металлов в месте их сопряжения после нагружения по схеме, аналогичной процессу сварки трением с перемешиванием. В дальнейшем одна из пластин была заменена на металл с ОЦК кристаллической решеткой. На последнем этапе моделируются особенности перераспределения атомов двух сопряженных пластин твердых растворов, соответствующих по структуре сплаву Д16. В ходе исследования численная модель процесса также усложняется. Сначала рассматривается нагружение вращающимся и поступательно движущимся инструментом цилиндрической формы, затем конусообразной. Далее к индентору прикладывается дополнительное периодическое вибрационное воздействие. Варьируются его направление, амплитуда и частота. В конечной модели явно учитывается исходная шероховатость соединяемых поверхностей посредством задания исходного зазора.

2. Численная модель процесса

Для проведения исследований на указанном масштабе был выбран метод молекулярной динамики в виде программного пакета LAMMPS [12]. Взаимодействие между частицами описывалось с помощью метода погруженного атома [13, 14]. Для изучения возможности проявления атомных механизмов в условиях нагружения, идентичных процессу сварки трением с перемешиванием, в работе моделировалось движение вращающегося абсолютно жесткого цилиндра вдоль поверхности сопряжения двух кристаллитов. Размеры кристаллитов модельных материалов Me1 и Me2 составляли $10.8 \times 21.7 \times 2.9$ нм. Таким образом, моделировалась пластина толщиной 4 радиуса обрезания межатомного потенциала. Моделируемый образец (рис. 1) содержал

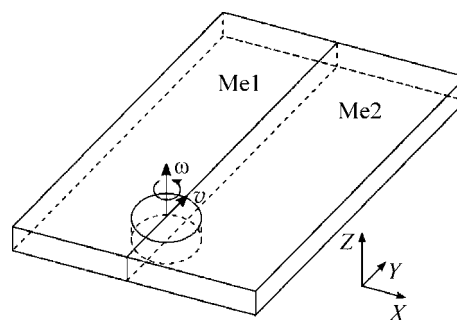


Рис. 1. Схематическое изображение моделируемого образца

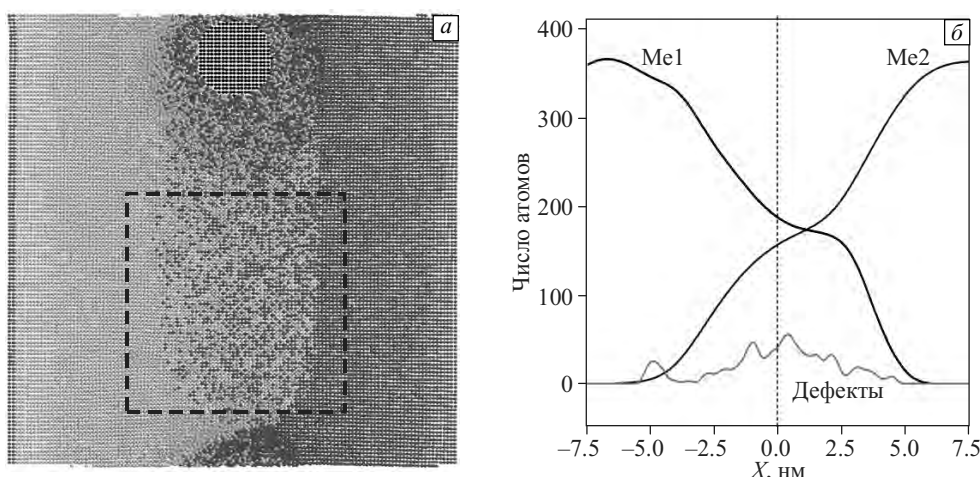


Рис. 2. Результирующая структура моделируемого образца, ориентированного параллельно плоскости XOY , после прохода инструмента в сопряженной паре однотипных металлов меди при скорости движения инструмента $v = 50$ м/с и $\omega = 0.1$ пс $^{-1}$ (а); пространственное распределение атомов металлов и дефектов структуры в выделенном пунктиром фрагменте на рис. 2, а (б). Здесь и далее вертикальной пунктирной линией отмечено исходное положение интерфейса двух металлов

более 75000 атомов. В качестве вращающегося инструмента была выбрана группа атомов, образующая цилиндр диаметром 3.6 нм с осью вдоль направления Z , как показано на рис. 1. Данные атомы вращались с постоянной угловой скоростью ω вокруг оси цилиндра. Дополнительно вся система двигалась поступательно как целое со скоростью v . Уравнения движения интегрировались с шагом по времени $\Delta t = 0.001$ пс.

Первоначально моделировался процесс, воспроизводящий на атомном масштабе условия нагружения, реализуемые при сварке трением с перемешиванием двух исходно бездефектных одинаковых кристаллитов меди. Скорости вращения и движения инструмента были выбраны $v = 50$ м/с и $\omega = 0.1$ пс $^{-1}$ соответственно. Отвод тепла из образца был реализован за счет введения искусственной вязкости для атомов, принадлежащих двум буферным слоям, расположенным вдоль внешних краев обоих фрагментов. Для имитации протяженных размеров моделируемого образца во всех направлениях задавалось действие периодических граничных условий. В дальнейшем рассматривалось аналогичное нагружение материалов с различными кристаллическими решетками и двух однотипных твердых растворов.

3. Результаты моделирования для двух однотипных металлов

3.1. Влияние скорости движения инструмента

Анализ структуры образца показал, что в результате прохода вращающегося инструмента в образце на стыке двух кристаллитов наблюдается перемешивание атомов, исходно принадлежащих различным фрагментам. На рис. 2, а показана проекция атомов на плоскость XOY в момент времени, соответствующий прохождению рабо-

чего инструмента практически вдоль всей длины области сопряжения двух исходно бездефектных кристаллитов меди. Различными оттенками серого цвета отмечены атомы, изначально принадлежащие кристаллитам Me1 и Me2. Видно, что след прохождения инструмента состоит из двух частей. Непосредственно за инструментом наблюдается зона нарушения кристаллической решетки. Атомы фрагментов Me1 и Me2 в ней присутствуют приблизительно в равных долях. Толщина этой зоны сопоставима с размерами вращающегося инструмента. При удалении инструмента на расстояние, сопоставимое с его диаметром, начинается область, в которой атомы в результате процесса релаксации занимают положения в узлах исходной кристаллической решетки. Особенностью этой области является градиентное расположение атомов фрагментов Me1 и Me2 в объеме противоположного фрагмента. Пространственное распределение атомов обоих металлов вблизи линии положения интерфейса приведено на рис. 2, б.

Анализ структуры кристаллической решетки с применением алгоритма поиска локальной топологии атомных связей [15, 16] позволил выявить формирование структурных дефектов. Однако их объемная доля по отношению к общему числу атомов ничтожно мала. Незначительное число дефектов с локальной топологией связей, отличной от ГЦК-структуры, наблюдается лишь вблизи исходного положения границы — линии сопряжения двух металлов (рис. 2, б). Согласно представленным зависимостям точка пересечения кривых изменения концентрации металлов Me1 и Me2 после прохождения инструмента смещена вправо относительно исходного положения интерфейса, что может быть объяснено направлением вращения индентора. Наличие точек излома на обеих кривых в месте их пересечения

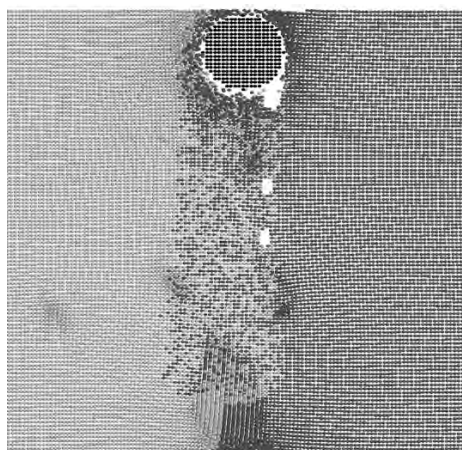


Рис. 3. Результирующая структура моделируемого образца, ориентированного параллельно плоскости XOY , после прохода цилиндрического инструмента в сопряженной паре однотипных металлов меди при скорости движения инструмента $v = 100$ м/с и $\omega = 0.1$ пс⁻¹

указывает на то, что существует слой толщиной ~ 2.5 нм (от 0 до 2.5 нм по оси X), в котором концентрация атомов противоположных фрагментов меняется незначительно.

При увеличении скорости движения инструмента по краю его «следа» может образоваться ряд структурных дефектов в виде нанопор. Исследования показали, что результирующая структура атомной решетки в этом случае в зоне прохождения инструмента также восстанавливается в идеальную ГЦК-конфигурацию. Отличительной особенностью такого «следа» является формирование большого числа дефектов структуры (вакансии, нанопоры, дислокации и дефекты упаковки).

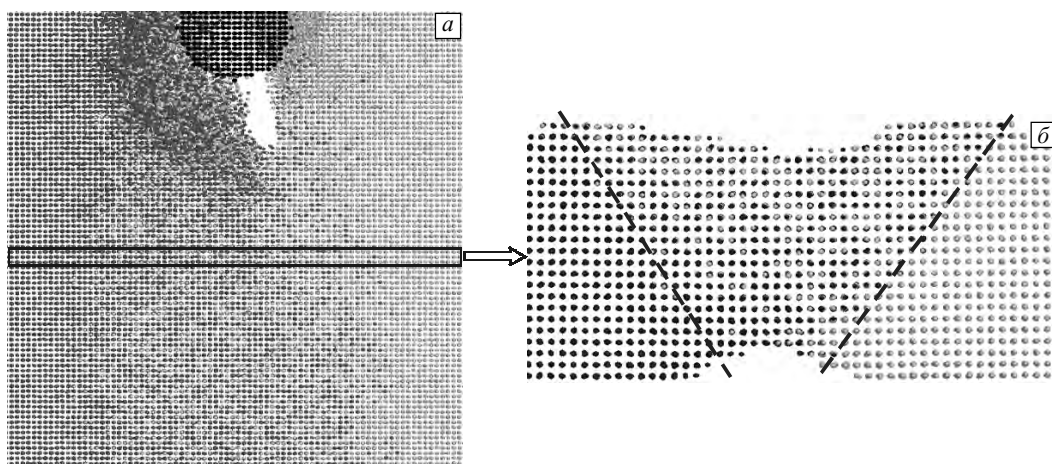


Рис. 4. Результирующая структура образца после прохождения конусовидного инструмента в сопряженной паре однотипных металлов без учета дополнительного вибрационного воздействия: проекция атомов на плоскость XOY (а); фрагмент центральной области образца, ориентированный параллельно плоскости XOZ (б). Пунктирными линиями отмечены приблизительные границы положения внедренных атомов

Момент формирования нанопоры хорошо виден на рис. 3, где представлена результирующая структура моделируемого образца после прохода инструмента.

3.2. Влияние действия осциллирующей нагрузки

В работе исследовалось влияние дополнительного осциллирующего воздействия, прикладываемого к индентору в вертикальном направлении (ось Z), на особенности реализации возможных атомных механизмов в условиях нагружения, идентичных процессу сварки трением с перемешиванием. Поскольку форма цилиндрического индентора в случае его вертикальных перемещений будет лишь незначительно менять результирующие напряжения, в данных исследованиях форма индентора была заменена на конус. Таким образом, моделировалось вращение абсолютно жесткого конуса, который двигался вдоль поверхности сопряжения двух кристаллитов. Размеры кристаллитов двух металлов Me1 и Me2 составляли $10.8 \times 21.7 \times 3.6$ нм. Высота конуса была выбрана равной толщине кристаллитов. Моделируемый образец рассматривался как NVE ансамбль, при этом сохранялось число частиц N , объем V и энергия системы E . Для интегрирования уравнений движения использовался скоростной алгоритм Верле. Первоначально моделировалось движение индентора без дополнительного вибрационного воздействия. Это позволяло провести сравнение результатов моделирования с предыдущими исследованиями, когда индентор был цилиндрической формы. На следующем этапе исследований дополнительно к перемещению вдоль направления Y вращающегося индентора задавалось его циклическое перемещение вдоль оси Z (см. схему на рис. 1). Амплитуда колебательного движения индентора A была равна 0.1 нм, а его частота $\omega' = 2$ пс⁻¹.

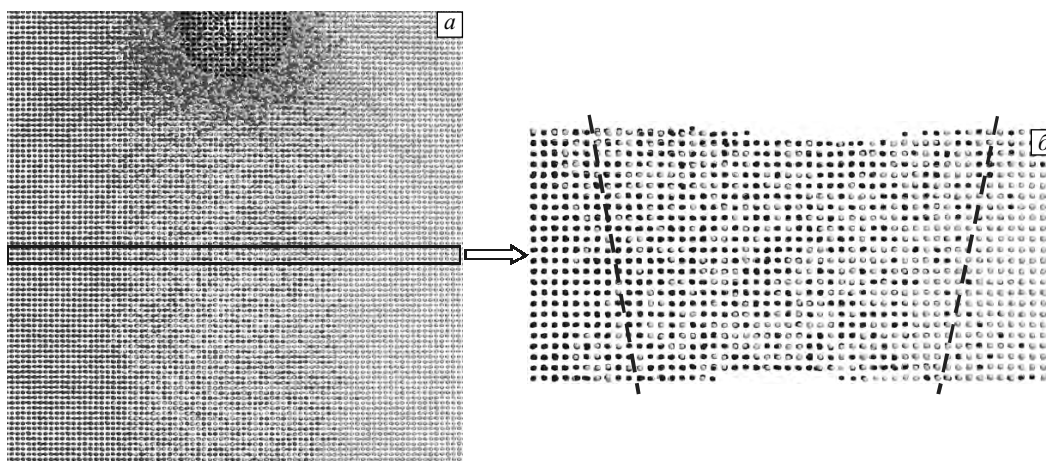


Рис. 5. Результирующая структура образца после прохождения конусовидного инструмента в паре однотипных металлов с учетом дополнительного вибрационного воздействия: проекция атомов на плоскость XOY (а); фрагмент центральной области образца, ориентированный параллельно плоскости XOZ (б). Пунктирными линиями отмечены приблизительные границы положения внедренных атомов

В случае нагружения вращающимся индентором конусовидной формы без дополнительного осциллирующего воздействия скорости его вращения и движения были выбраны $v = 50$ м/с и $\omega = 0.1$ пс⁻¹ соответственно. Анализ структуры образца показал, что в результате прохода вращающегося инструмента в образце на стыке двух кристаллитов наблюдается перемешивание атомов, исходно принадлежащих различным фрагментам. Данный результат идентичен тому, что был получен для цилиндрического индентора. На рис. 4, а показана проекция атомов на плоскость XOY в момент времени, соответствующий прохождению рабочего инструмента практически вдоль всей длины области сопряжения двух металлов. Различными оттенками серого цвета отмечены атомы, изначально принадлежащие кристаллитам Me1 и Me2. На рис. 4, б показана проекция атомов центрального фрагмента на плоскость XOZ . Видно, что ширина слоя, где наблюдается взаимное внедрение атомов, первоначально принадлежащих противоположному кристаллиту, значительно шире в верхней части образца. Это обусловлено конусовидной формой инструмента. Анализ структуры кристаллической решетки с применением алгоритма поиска локальной топологии атомных связей позволил выявить формирование структурных дефектов. Однако, как и ранее, их объемная доля по отношению к общему числу атомов ничтожно мала. Таким образом, отличительной особенностью использования конусовидного индентора является результирующее неравномерное распределение внедренных атомов в поперечном направлении вдоль линии сопряжения металлов в сравнении с результатом, полученным с использованием цилиндрического инструмента.

Другой отличительной особенностью нагружения двух сопряженных кристаллитов с помощью конусо-

видного индентора является возможность формирования дефектов структуры типа нанопор в области границы получаемого «следа» с ненагруженной частью одного из кристаллических фрагментов. Формирование дефектов такого рода может быть объяснено неоднородным нагружением кристаллической структуры вдоль линии вращения конусовидного инструмента. Для того чтобы сделать распределение приложенных напряжений более равномерным, на следующем этапе исследований при продольном прохождении конусовидного индентора к нему дополнительно прикладывалась осциллирующая нагрузка, направленная вдоль оси Z .

Полученные результаты моделирования подтвердили сделанные предположения. В отличие от предыдущего примера, в области границы «следа», оставленного после прохождения инструмента, с ненагруженной частью кристаллитов дефекты структуры в виде нанопор не образуются (рис. 5, а). Результатом воздействия дополнительного осциллирующего движения инструмента также является более равномерное распределение внедренных атомов по всей глубине образца для интерфейсной области, где наблюдается перемешивание атомов, изначально принадлежащих противоположным кристаллитам (ср. рис. 4, б и 5, б).

4. Сопряжение металлов с различным типом кристаллической решетки

4.1. Использование цилиндрического индентора

На следующей стадии исследований был изучен процесс, воспроизводящий на атомном масштабе условия нагружения, реализуемые при сварке трением с перемешиванием для металлов с различным типом кристаллической решетки. Данное исследование использова-

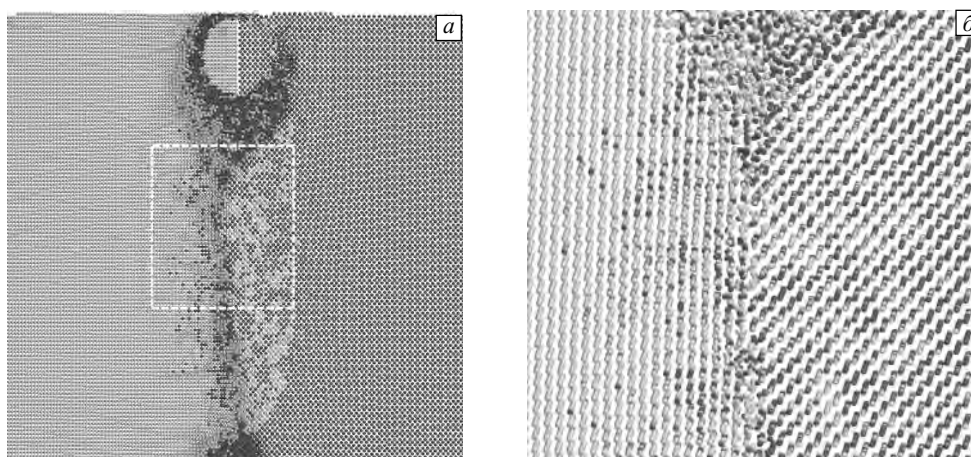


Рис. 6. Результирующая структура образца, ориентированного параллельно плоскости XOY , после прохода инструмента в сопряженной паре разнородных материалов. Изображение (б) соответствует фрагменту, выделенному на рисунке (а)

лось для верификации полученного ранее результата для случая двух одинаковых металлов. Вдоль направлений Y и Z моделировались периодические условия. В направлении X задавались жесткие граничные условия. Как и в предыдущем случае, взаимодействие рассчитывалось с использованием модели метода погруженного атома. Размеры моделируемых фрагментов Me_1 и Me_2 были равны $21.7 \times 21.7 \times 2.9$ нм. Число атомов в каждом из сопряженных кристаллитов превышало 120000. Исходная кристаллографическая ориентация обоих металлов была выбрана как $[100]$, $[010]$ и $[001]$ вдоль осей X , Y и Z лабораторной системы координат соответственно. Скорости движения и вращения инструмента составляли $v = 50$ м/с и $\omega = 0.1$ ps^{-1} соответственно. Как и ранее, отвод тепла из образца был реализован за счет введения искусственной вязкости для атомов, принадлежащих двум буферным слоям, расположенным вдоль внешних по отношению к плоскости сопряжения краев фрагментов.

Результаты моделирования показали, что после прохода вращающегося инструмента на границе раздела кристаллитов наблюдается формирование сложной конфигурации, где происходит перемешивание атомов сопряженных металлов (рис. 6). Детальный анализ результирующей структуры показал, что вблизи исходной плоскости сопряжения произошло внедрение атомов одного металла в решетку противоположного с замещением атомов в узлах его кристаллической решетки. Это хорошо видно на рис. 6, б, где показано увеличенное изображение фрагмента структуры вблизи области исходной границы сопряжения двух металлов непосредственно после прохождения инструмента. Следует отметить, что полученный результат, свидетельствующий о том, что при определенных условиях нагружения часть атомов меди может выстраиваться в ОЦК-решетку железа, находит свое подтверждение и в работах других

авторов, в том числе и при экспериментальных исследованиях [17, 18]. Таким образом, обнаруженный результат является еще одним подтверждением возможности получения подобных металлических соединений.

На рис. 7, где представлено распределение концентрации атомов обоих металлов вдоль оси X в выделенном фрагменте, можно также видеть незначительное перемещение положения интерфейса (области, где наблюдается смена кристаллографического порядка) в сторону кристаллита более мягкого по механическим свойствам. Как и ранее, наблюдается градиентный характер внедрения атомов обоих металлов, однако ширина этой зоны меньше в сравнении с результатами, полученными для сопряженной пары однотипных металлов. Данный результат может быть объяснен разницей типов кристаллической решетки сопряженных металлов. Этим же объясняется наличие множества дефектов структуры,

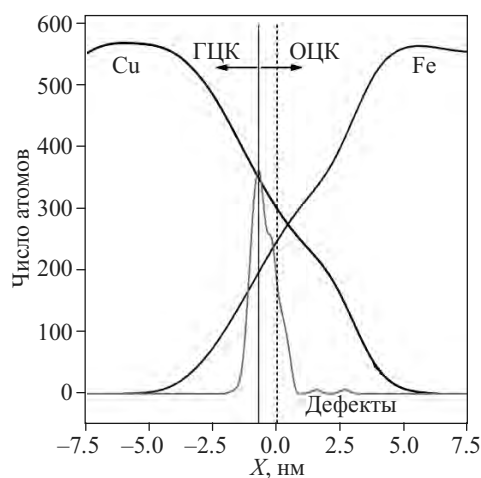


Рис. 7. Пространственное распределение атомов металлов и дефектов структуры в выделенном пунктиром фрагменте на рис. 6, а

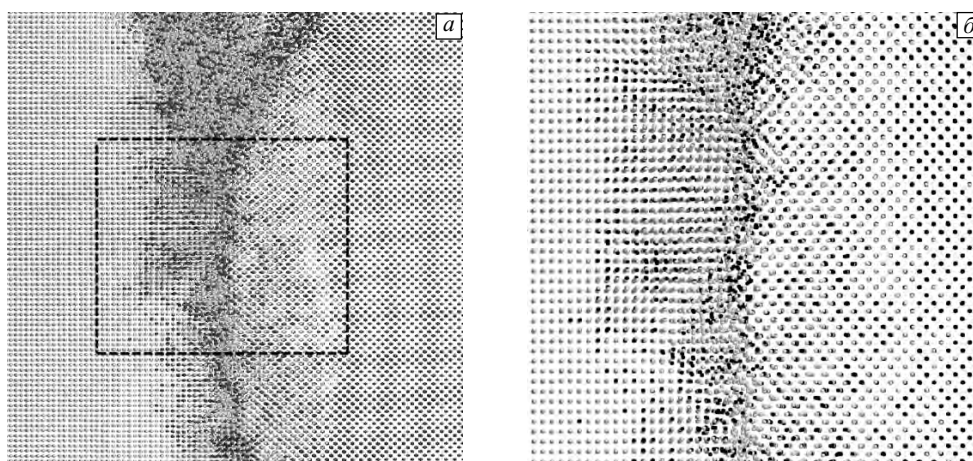


Рис. 8. Проекция атомов на плоскость XOY после прохода конического инструмента в сопряженной паре разнородных металлов с учетом дополнительного вибрационного воздействия. Изображение (б) соответствует фрагменту, выделенному на рисунке (а)

расположенных преимущественно вдоль плоскости сопряжения, полученных после прохождения вращающегося инструмента.

4.2. Действие инструмента конусовидной формы

Как и в предыдущем примере сопряжения двух одинаковых металлов, на следующей стадии исследований для конусовидного индентора дополнительно моделировалось действие осциллирующего нагружения. Исследовались атомные механизмы процесса, воспроизводящего на атомном масштабе условия нагружения, реализуемые при сварке трением с перемешиванием, для металлов с различным типом кристаллической решетки. Размеры моделируемых фрагментов Me1 и Me2 были равны $21.7 \times 21.7 \times 3.5$ нм. Исходная кристаллографическая ориентация обоих кристаллитов была выбрана как $[100]$, $[010]$ и $[001]$ вдоль соответствующих осей. Скорость движения инструмента v была равна 50 м/с, а

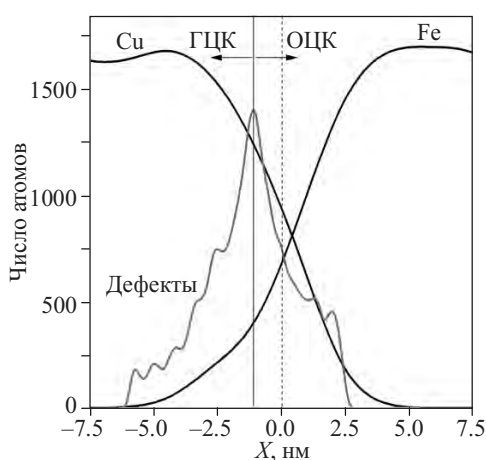


Рис. 9. Пространственное распределение атомов обоих металлов и дефектов структуры во фрагменте на рис. 8, б

его угловая скорость $\omega = 0.1 \text{ пс}^{-1}$. Параметры осциллирующей нагрузки были выбраны следующими: амплитуда $A = 0.1$ нм и частота $\omega' = 2 \text{ пс}^{-1}$.

Результаты моделирования показали, что, как и ранее, после прохода вращающегося инструмента на границе раздела кристаллитов наблюдается формирование сложной конфигурации, где происходит перемешивание атомов, исходно принадлежащих различным металлам. Детальный анализ результирующей структуры показал, что вблизи исходной плоскости сопряжения произошло внедрение атомов Cu в решетку ОЦК с замещением атомов в узлах кристаллической решетки и, наоборот, атомы Fe заместили атомы Cu в его кристаллической решетке (рис. 8). В отличие от результатов, полученных с использованием цилиндрического индентора без дополнительного осциллирующего воздействия, конечное положение интерфейса для двух кристаллических решеток смещается в сторону меди на большую величину. На рис. 9 приведено пространственное распределение числа атомов обоих металлов в зависимости от их положения вдоль оси X во фрагменте на рис. 8, б. Отличительной особенностью представленного результата является увеличение ширины слоя, в котором расположены атомы, локальная топология атомных связей которых не может быть соотнесена ни с ГЦК-, ни с ОЦК-решетками обоих металлов. Таким образом, действие осциллирующего нагружения приводит к увеличению числа возникающих дефектов структуры. Точка пересечения двух кривых, отражающих изменение числа атомов различных металлов, как и в предыдущем случае, смещается в сторону кристаллита железа.

5. Сопряжение двух одинаковых твердых растворов

Результаты, представленные выше, были получены для чистых металлов, обладающих идеальной кристал-

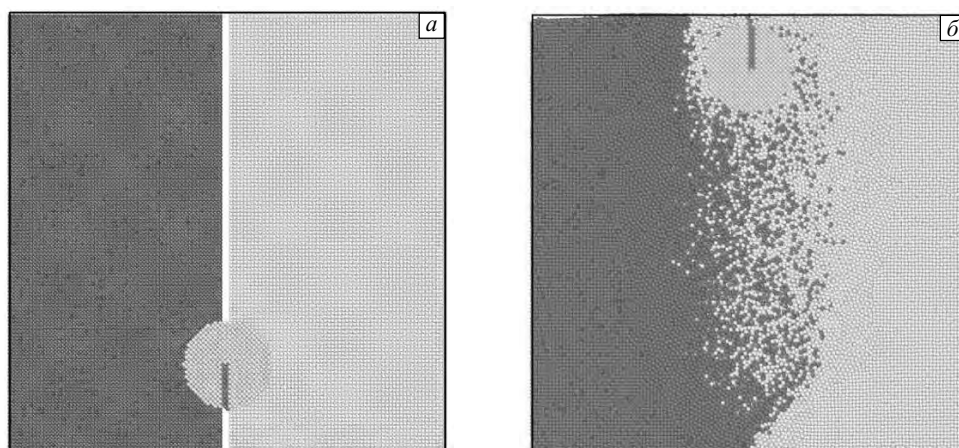


Рис. 10. Проекция атомов модели на плоскость XOY в различные моменты времени. Более темным оттенком серого в обоих кристаллитах показаны атомы Cu

лической структурой. В то же время большинство материалов, применяемых на практике для изготовления различных узлов и конструкций, в частности при помощи сварки трением с перемешиванием, являются металлическими сплавами, представляющими собой твердые растворы. Их кристаллическая структура может содержать определенное количество различных дефектов или включений, в том числе частицы интерметаллидов. В связи с этим разработанная численная модель для анализа атомных механизмов, реализующихся в условиях нагружения, идентичных процессу сварки трением с перемешиванием, может быть применена и для исследования особенностей поведения атомных решеток твердых растворов. В работе с этой целью были выбраны два кристаллита, атомная структура которых соответствовала сплаву Д16. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалами, рассчитанными с помощью метода модифицированного погруженного атома [19]. Для имитации условий нагружения, идентичных условиям сварки трением с перемешиванием, как и в предыдущих расчетах, моделировалось движение вращающегося абсолютно жесткого конуса вдоль области сопряжения двух кристаллитов. В области контакта исходно создавался зазор для имитации влияния шероховатости торцов соединяемых кристаллитов.

Для задания структуры сплава Д16 в идеальной ГЦК-решетке из атомов Al случайным образом 5% атомов Al заменялось на атомы Cu, которые соответствуют фазе интерметаллида. Размеры каждого кристаллита составляли $12.2 \times 24.4 \times 2.03$ нм. Моделируемый образец содержал более 75 000 атомов. Вдоль направлений X и Y моделировались жесткие граничные условия. В направлении оси Z задавались свободные поверхности. Исходная кристаллографическая ориентация обоих кристаллитов была выбрана как $[100]$, $[010]$ и $[001]$ вдоль соответствующих осей. Атомы индентора враща-

лись с постоянной угловой скоростью $\omega = 0.1 \text{ пс}^{-1}$ вокруг оси конуса. Дополнительно вся система двигалась поступательно как целое со скоростью $v = 50 \text{ м/с}$. Как и ранее отвод тепла из образца был реализован за счет введения искусственной вязкости для атомов буферных слоев обоих фрагментов.

Результаты моделирования показали, что после прохода конусообразного инструмента на границе раздела кристаллитов наблюдается формирование сложной конфигурации, где присутствует перемешивание как атомов Cu, так и атомов Al. Проекция атомов кристаллитов на плоскость XOY в начальный момент и в момент времени, соответствующий полному проходу инструмента вдоль линии шва, приведены на рис. 10. Из рис. 10 видно, что после формирования сварного шва в обеих пластинах присутствуют атомы как первого, так и второго кристаллитов. При этом доля атомов одного кристаллита в составе другого достаточно быстро уменьшается при удалении от шва и на расстоянии, соответствующем диаметру инструмента, становится равной нулю.

5.1. Влияние действия осциллирующей нагрузки

В работе было исследовано влияние дополнительного вибрационного воздействия, прикладываемого к вращающемуся и поступательно движущемуся коническому индентору. Периодическое движение инструмента осуществлялось в направлении оси Z по синусоидальному закону с угловой скоростью $\omega = 0.1 \text{ пс}^{-1}$ и амплитудой A , равной 4.16% диаметра инструмента.

Для анализа результирующей структуры в области «следа», полученного после прохождения инструмента, в работе рассчитывались кривые пространственного распределения вещества, характеризующие изменение концентрации атомов каждого из кристаллитов вдоль направления X . Распределения строились для области моделируемой сборки, находящейся между начальной

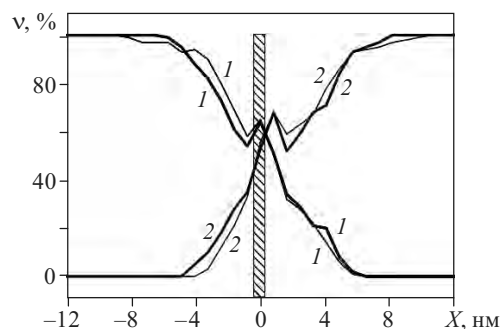


Рис. 11. Распределение v атомов по длине L_x моделируемых кристаллитов в различные моменты времени их сопряжения. Кривые распределений соответствуют атомам первого (1) и второго кристаллита (2)

и конечной точками движения индентора. Алгоритм построения кривых распределения атомов был аналогичен тому, что использовался ранее для чистых металлов и заключался в следующем. Выделенная область разделилась на ряд одинаковых подобластей, имеющих форму прямоугольных параллелепипедов с шириной два параметра решетки алюминия. В каждой из областей рассчитывалось количество атомов каждого из кристаллитов и определялась их доля относительно данных величин в начальный момент времени. Для исходной модели, в которой отсутствует перемешивание атомов кристаллитов, данная диаграмма распределения имеет четко выраженный ступенчатый вид.

На рис. 11 приведена диаграмма распределения атомов в кристаллитах после их соединения обычным способом и с использованием дополнительного вибрационного воздействия. Здесь и далее заштрихованный прямоугольник соответствует положению исходного зазора между кристаллитами. Толщина кривых указывает на различные способы воздействия на движущийся индентор: тонкие — без использования вибрационного воздействия, толстые — с применением вибрационного воздействия. Из рисунка видно, что в случае процесса

с вибрационным воздействием глубина проникновения атомов одного кристаллита в другой увеличивается приблизительно на 20 % по сравнению с аналогичной величиной для процесса без вибрационного воздействия. Изломы кривых распределения атомов в области сопряжения кристаллитов обусловлены отсутствием там атомов в начальный момент времени и последующим заполнением данной области при формировании шва.

5.2. Действие осциллирующего нагружения различной частоты

В работе было также исследовано влияние увеличения частоты дополнительного вибрационного воздействия, прикладываемого к вращающемуся и поступательно движущемуся цилиндрическому инструменту, на динамику процесса перемешивания атомов кристаллитов. Периодическое движение инструмента осуществлялось в направлении оси X по синусоидальному закону с угловой скоростью ω_v . В различных расчетах значение ω_v варьировалось в интервале от 0.2 до 1.0 пс^{-1} . Амплитуда вибрационного воздействия составляла 4.16 % диаметра инструмента. Результаты расчетов показали, что увеличение частоты вибрационного воздействия приводит к росту глубины проникновения атомов одного кристаллита в другой в области их сопряжения. На рис. 12, а приведены диаграммы распределения атомов в кристаллитах после их соединения с использованием дополнительного вибрационного воздействия с частотами ω_v , равными 0.2 и 1.0 пс^{-1} . Из рисунка видно, что увеличение частоты ω_v вызывает увеличение глубины проникновения атомов одного кристаллита в другой на величину от 16 до 25 %. При этом для всех значений из исследованного интервала частот вибрационного воздействия увеличение глубины проникновения атомов на большую величину наблюдается в кристаллите, направление движения атомов которого совпадает с направлением поступательного движения инструмента. Изломы кривых распределения атомов в области сопря-

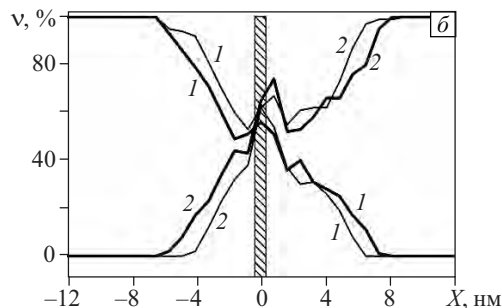
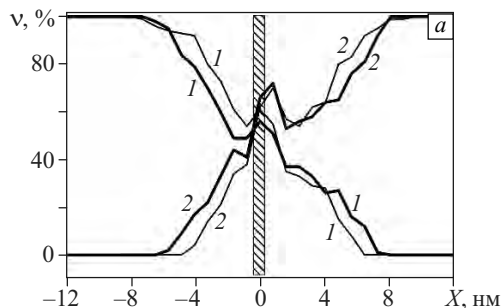


Рис. 12. Распределение v атомов вдоль длины L_x моделируемых кристаллитов после прохождения инструмента с различными значениями частоты (а) и амплитуды вибрационного воздействия (б). Толщина кривых соответствует процессу сварки: тонкие — с удвоенной частотой вращения инструмента, толстые — с десятикратно увеличенной частотой вращения инструмента (а); тонкие — с амплитудой, составляющей 0.83 % диаметра инструмента, толстые — с амплитудой, составляющей 4.16 % диаметра инструмента (б). Кривые распределений соответствуют атомам первого (1) и второго кристаллита (2)

жения кристаллитов, как и в предыдущих расчетах, обусловлены отсутствием атомов в области щели в начальный момент времени и ее последующим заполнением при формировании шва.

5.3. Действие осциллирующего нагружения различной амплитуды

Для моделируемой системы было также исследовано влияние увеличения амплитуды вибрационного воздействия, прикладываемого к вращающемуся и поступательно движущемуся цилиндрическому инструменту. Периодическое колебание инструмента, как и в предыдущих расчетах, осуществлялось в направлении оси X по синусоидальному закону с угловой скоростью $\omega_v = 0.1 \text{ пс}^{-1}$. Значение амплитуды вибрационного воздействия A_v для различных расчетов находилось в интервале от 0.83 до 4.16 % от величины диаметра цилиндрического инструмента. Результаты исследований показали, что увеличение амплитуды вибрационного воздействия приводит к увеличению глубины проникновения атомов одного кристаллита в другой в области их сопряжения.

На рис. 12, б приведены диаграммы распределения атомов в кристаллитах после их соединения с использованием вибрационного воздействия с амплитудой A , составляющей 0.83 и 4.16 % от значения диаметра цилиндрического инструмента. Из рисунка видно, что увеличение амплитуды A_v вибрационного воздействия приводит к росту глубины проникновения атомов одного кристаллита в другой на величину от 16 до 25 %. При этом, как и в случае сопряжения кристаллитов с различными значениями частот вибрационного воздействия, наблюдается проникновение атомов на большую глубину в кристаллите, направление движения атомов которого при сварке совпадает с направлением поступательного движения инструмента. Изломы кривых распределения атомов в области сопряжения кристаллитов также, как в вышеописанных расчетах, обусловлены отсутствием атомов в области зазора в начальный момент времени и ее последующим заполнением при формировании шва.

Результаты анализа динамики процесса сварки трением с перемешиванием на масштабе от 1 до 10 нм показывают, что применение ультразвукового воздействия к рабочему элементу в направлении, параллельном оси вращения инструмента, приводит к равномерному внедрению элементов противоположной пластины в околошовную зону вдоль вертикального сечения, что означает повышение прочности соединения сопряженных материалов.

6. Выводы

На основе представленных результатов исследования можно сделать следующие выводы. Несмотря на

принципиальную разницу характерных пространственных и временных параметров результаты компьютерного моделирования находятся в хорошем качественном согласии с данными экспериментальных исследований. Предложенная компьютерная модель может являться тестовой системой для исследования основных закономерностей формирования структурных неоднородностей, генерируемых при использовании технологии сварки трением с перемешиванием. Полученные результаты моделирования могут иметь важное практическое значение: они позволяют выявить новые способы и механизмы получения неравновесных состояний в кристаллической решетке за счет инициации процесса механически активируемой взаимной диффузии металлов на атомном масштабе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (идентификатор проекта RFMEFI57814X0045).

Литература

1. *Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов*: в 2 т. / Под ред. В.Е. Панина. – Новосибирск: Наука, 1995. – Т. 1. – 298 с., Т. 2. – 320 с.
Physical Mesomechanics of Heterogeneous Media and Computer-Aided Design of Materials / Ed. by V.E. Panin. – Cambridge: Cambridge Interscience Publishing, 1998. – 450 p.
2. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Елсукова Т.Ф. Физическая мезомеханика зернограницного скольжения в деформируемом поликристалле // Физ. мезомех. – 2011. – Т. 14. – № 6. – С. 15–22.
Panin V.E., Egorushkin V.E., Elskova T.F. Physical mesomechanics of grain boundary sliding in a deformable polycrystal // Phys. Mesomech. – 2013. – V. 16. – No. 1. – P. 1–8.
3. *Uzunova-Bujnova M., Dimitrov D., Radev D., Bojinova A., Todorovskiy D. Effect of the mechanoactivation on the structure, sorption and photocatalytic properties of titanium dioxide* // Mater. Chem. Phys. – 2008. – V. 110. – No. 2–3. – P. 291–298.
4. *Clayton J.D., Kraft R.H., Leavy R.B. Mesoscale modeling of nonlinear elasticity and fracture in ceramic polycrystals under dynamic shear and compression* // Int. J. Sol. Struct. – 2012. – V. 49. – No. 18. – P. 2686–2702.
5. *Mishra R.S., Mahoney M.W. Friction Stir Welding and Processing*. – ASM International, 2007. – 352 p.
6. Колубаев Е.А. Исследование особенностей микроструктуры алюминий-магниевого сплава, полученной при сварке трением с перемешиванием // Изв. вузов. Физика. – 2014. – Т. 57. – № 10. – С. 22–27.
Kolubaev E.A. Features of aluminum magnesium alloy microstructure produced by friction stir welding // Izv. Vuzov. Fiz. – 2014. – V. 57. – No. 10. – P. 22–27.
7. *Tarasov S.Yu., Rubtsov V.E., Kolubaev E.A. A proposed diffusion-controlled wear mechanism of alloy steel friction stir welding (FSW) tools used on an aluminum alloy* // Wear. – 2014. – V. 318. – No. 1–2. – P. 130–134.
8. *Dmitriev A.I., Österle W., Kloss H. Numerical simulation of typical contact situations of brake friction materials* // Tribol. Int. – 2008. – V. 41. – No. 1. – P. 1–8.
9. *Dmitriev A.I., Popov V.L., Psakhie S.G. Simulation of surface topography with the method of movable cellular automata* // Tribol. Int. – 2006. – V. 39. – No. 5. – P. 444–449.
10. *Österle W., Dmitriev A.I., Kloss H. Possible impacts of third body nanostructure on friction performance during dry sliding determined by computer simulation based on the method of movable cellular automata* // Tribol. Int. – 2012. – V. 48. – P. 128–136.

11. Дмитриев А.И., Никонов А.Ю., Псахье С.Г. Атомистический механизм зернограничного проскальзывания на примере большеугловой границы $\Sigma = 5$. Молекулярно-динамический расчет // Физ. мезомех. – 2010. – Т. 13. – № 4. – С. 15–24.
Dmitriev A.I., Nikonov Yu.A., Psakhie S.G. Atomistic mechanism of grain boundary sliding with the example of a large-angle boundary $\Sigma = 5$. Molecular dynamics calculation // Phys. Mesomech. – 2011. – V. 14. – No. 1–2. – P. 24–31.
12. Plimpton S.J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. – 1995. – V. 117. – No. 1. – P. 1–19.
13. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F., Kress J.D. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // Phys. Rev. B. – 2001. – V. 63. – P. 224106.
14. Bonny G., Pasianot R. C., Castin N., Malerba L. Ternary Fe-Cu-Ni many-body potential to model reactor pressure vessel steels: First validation by simulated thermal annealing // Philos. Mag. – 2009. – V. 89. – P. 3531–3546.
15. Honeycutt D.J., Andemen H.C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters // J. Phys. Chem. – 1987. – V. 91. – P. 4950–4963.
16. Псахье С.Г., Зольников К.П., Дмитриев А.И., Крыжевич Д.С., Никонов А.Ю. Локальные структурные трансформации в ГЦК-решетке в условиях контактного взаимодействия различного типа. Молекулярно-динамическое исследование // Физ. мезомех. – 2012. – Т. 15. – № 1. – С. 23–31.
Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Dmitriev A.I., Kryzhevich D.S., Nikonov A.Y. Local structural transformations in the fcc lattice in various contact interaction. Molecular dynamics study // Phys. Mesomech. – 2012. – V. 15. – No. 3–4. – P. 147–154.
17. *Heinric B. et al.* Ferromagnetic and antiferromagnetic exchange coupling in bcc epitaxial ultrathin Fe(001)/Cu(001)Fe(001) trilayers // Phys. Rev. Lett. – 1990. – V. 64. – P. 673–676.
18. Wang Z.Q., Lu S.H., Li Y.S., Jona F., Marcus P.M. Epitaxial growth of a metastable modification of copper with body-centered-cubic structure // Phys. Rev. B. – 1987. – V. 35 – P. 9322–9325.
19. Baskes M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // Phys. Rev. B. – 1992. – V. 46. – P. 2727.

Поступила в редакцию
23.10.2014 г.

Сведения об авторах

Никонов Антон Юрьевич, мнс ИФПМ СО РАН, нс ТГУ, anickonoff@ispms.tsc.ru

Коноваленко Иван Сергеевич, нс ИФПМ СО РАН, ivkon@ispms.tsc.ru

Дмитриев Андрей Иванович, д.ф.-м.н., доц., внс ИФПМ СО РАН, проф. ТГУ, dmitr@ispms.tsc.ru

Псахье Сергей Григорьевич, д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, дир. ИФПМ СО РАН, зав. каф. ТПУ, проф. Сколттех, sp@ispms.tsc.ru