



Dedicated to the memory of Ulian Gaiikovich Pirumov

**PROCEEDINGS
OF THE XIX INTERNATIONAL CONFERENCE
ON COMPUTATIONAL MECHANICS
AND MODERN APPLIED SOFTWARE SYSTEMS**



CMMASS'2015

**24–31 May, 2015
Alushta, Crimea**



1. Валиев Р. З., Александров И. В. Объемные наноструктурные металлические материалы. — М.: Академкнига, 2007. — 397 с.
2. Козулин А. А., Скрипняк В. А., Красновейкин В. А., Скрипняк В. В., Каравацкий А. К. Исследование физико-механических свойств ультрамелкозернистых магниевых сплавов после интенсивной пластической деформации // Известия вузов. Физика. — 2014. — Т. 57, №9. — С. 98–104.
3. Скрипняк В. А., Скрипняк Н. В., Скрипняк В. В., Козулин А. А., Скрипняк Е. Г. Влияние зеренной структуры материалов на усталостную долговечность в малоцикловой области // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2013. — Т. 56, №7–3. — С. 83–85.
4. Красновейкин В. А., Скрипняк В. А., Козулин А. А. Численное моделирование процессов интенсивной пластической деформации тел при динамическом канальном прессовании // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2012. — Т. 55, №9-3. — С. 67–71.
5. Гаркушин Г. В., Разоренов С. В., Красновейкин В. А., Козулин А. А., Скрипняк В. А. Влияние структурных факторов на механические характеристики магниевого сплава Ма2-1 при квазистатическом и высокоскоростном деформировании // Физика твердого тела. — 2015, Т. 57. — Вып. 2. — С. 321–327.

ЗАРОЖДЕНИЕ И РАЗВИТИЕ ЛОКАЛЬНЫХ СТРУКТУРНЫХ ТРАНСФОРМАЦИЙ ПРИ НАНОИНДЕНТИРОВАНИИ ОЦК-ЖЕЛЕЗА*

Д. С. Крыжевич, А. В. Корчуганов, К. П. Зольников, С. Г. Псахье

ИФПМ СО РАН, Томск, Россия

Малые размеры компонентов различного рода микромеханических устройств, используемых в электронике, требуют соответствующих методов исследования их физико-механических параметров. Эффективным универсальным инструментом для изучения прочностных характеристик материалов на наноструктурном уровне является наноиндентирование [1]. Следует отметить, что металлы с ОЦК-решеткой численными методами изучены достаточно мало. В связи с этим в настоящей работе была поставлена задача исследовать отклик металлов как с идеальной ОЦК-решеткой, так и содержащих межзеренную границу, при наноиндентировании.

Поставленная задача решалась на основе молекулярно-динамического подхода. Объектом изучения был кристаллит ОЦК-железа. Описание межатомного взаимодействия проводилось на основе многочастичного потенциала, рассчитанного в приближении Финниса–Синклера [2]. В моделируемом кристаллите была построена симметричная наклонная граница зерна. Такого типа границы зерен позволяют корректно использовать периодические граничные условия. Для большей наглядности структурных изменений в исследуемом кристаллите и упрощения анализа результатов моделирования нагружение осуществлялось индентором в форме цилиндра. При таком выборе индентора область контакта является линейно-протяженной вдоль направления от одной грани моделируемого образца до другой. Для оценки величины атомных смещений использовался приведенный вектор смещений [3].

Моделируемые образцы имели форму параллелепипеда. Размеры кристаллита с идеальной структурой составляли $170 \times 170 \times 170 \text{ \AA}$, а кристаллита с границей зерна (ГЗ) — $230 \times 170 \times 170 \text{ \AA}$. Ось цилиндрического индентора, в качестве кото-

*Работа выполнена в рамках в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы.

рого использовалось отталкивающее внешнее поле, ориентировалась параллельно нагружаемой поверхности кристаллитов. Индентор двигался с постоянной скоростью 1 м/с. Кинетическая температура образцов составляла 300 К.

Результаты расчетов силы реакции образца в зависимости от глубины вдавливания индентора представлены на рис. 1. Кривые силы реакции для обоих кристаллитов очень похожи. Области линейного роста силы реакции от глубины вдавливания соответствуют упругому отклику кристаллитов. Начало зарождения пластической деформации можно определить по резкому уменьшению силы реакции, которое сопровождалось формированием локальных структурных изменений. Анализ результатов индентирования показал, что локальные структурные изменения формируют атомы, у которых величина приведенного вектора смещений превышает 0,2. Отметим, что для кристаллита с ГЗ пластическая деформация зарождается при меньших глубинах вдавливания. Такой отклик связан не только с наличием ГЗ в кристаллите, но и тем фактом, что линия контакта индентора была ориентирована по-другому относительно нагружаемой поверхности, чем в случае кристаллита с идеальной решеткой. Рост и падение кривых силы реакции кристаллитов на рис. 1 хорошо коррелирует с кривыми, показывающими изменение числа атомов, формирующих локальные структурные изменения.

Анализ результатов расчета показывает, что локальные структурные изменения первоначально зарождаются в области контакта индентора с поверхностью, а затем начинают распространяться по плоскостям скольжения в направлении к боковым. Их выход на боковую грань приводит к формированию ступеньки на свободной поверхности. Следует отметить, что ГЗ препятствует распространению локальных структурных изменений в соседнее зерно.

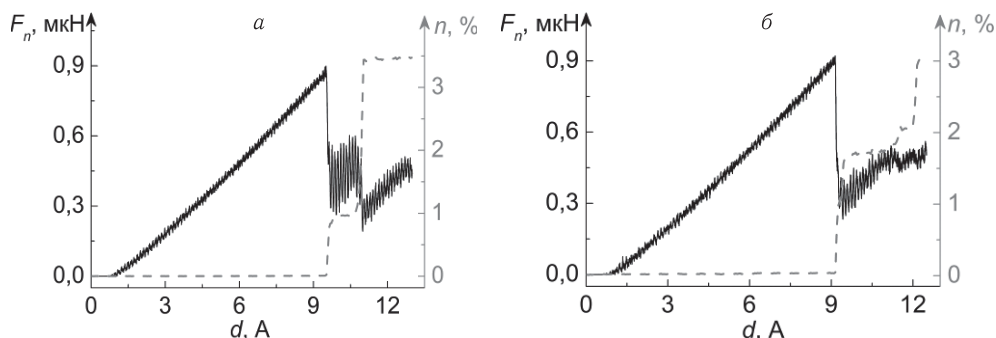


Рис. 1. Сила реакции образца (F_n) и доля структурных дефектов (n) в зависимости от глубины вдавливания индентора (d) для монокристалла (*а*) и кристаллита с ГЗ (*б*)

Проведенные расчеты показали, что межзеренные границы препятствуют распространению дефектов структуры, которые формируются при наноиндентировании. Обнаружено, что аккомодация кристаллита с ГЗ при нагружении осуществляется не только за счет генерации дефектов в области контакта, но и в области межзеренной границы. Выход дефектов структуры на свободную поверхность ведет к ее формоизменению, в частности, образованию на ней ступеньки.

1. Головин Ю. И. Наноиндентирование и его возможности. — М.: Машиностроение, 2009. — 312 с.
2. Mendeleev M. I., Han S., Srolovitz D. J., Ackland G. J., Sun D. Y., Asta M. // *Phil. Mag.* — 2003. — V. 83, No. 35. — P. 3977–3994.
3. Псахье С. Г., Крыжевнич Д. С., Зольников К. П. // *ПЖТФ.* — 2012. — Т. 38. — С. 80.