

УДК 530

ДВУХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛА В ПРОЦЕССЕ НАНОИНДЕНТИРОВАНИЯ

© В.Б. Мачихин, А.А. Арзамасцев

Machikhin V.B., Arzamastsev A.A. A two-dimensional model of material structure under nanoindentation. A computerised model is proposed that allows circumscribing the process of inculcating a nanoindenter in material. The model is based on the employment of the methods of molecular dynamics and the Verle algorithm in high-speed form. A plane (i.e. two-dimensional) case was considered on the grid of elements 14×14 corresponding with an area of $1,6 \times 1,6$ nm. The results of the simulation proved to be consistent with the experimental investigations of nanoindentation processes carried out earlier by others.

Наноиндентирование (depth sensing testing) – это метод исследования механических свойств различных материалов (например, тонких пленок, покрытий, небольших объектов и т. д.), путем вдавливания в исследуемый объект индентора на глубину до 0,1–1 нм [1].

В наномасштабе значительно меняются как сами свойства материала, так и представления о происходящих явлениях и процессах [2]. Так, окончательно не выяснено, какие атомные механизмы массопереноса определяют размер отпечатка, какова структура материала под наноиндентором, микромеханизмы упрочнения, контролирующее сопротивление внедрению наноиндентора, а также какова природа частичного или полного восстановления отпечатка после снятия нагрузки [2–4].

Основные проблемы при наноиндентировании заключаются в определении связи указанных процессов с другими фундаментальными характеристиками материалов, а также в необходимости извлечения информации о свойствах объектов из результатов наноиндентирования (кривых нагружения-разгрузки, результатов многократных нагружений и т. д.)

Очевидно, что в решении этих задач может оказаться полезным воспользоваться компьютерным моделированием, которое в последнее время становится эффективным методом исследования в физике твердого тела [5–13]. С помощью этого метода исследовали: механизм перехода однородного кристалла аргона [5], процессы зарождения дефектов в монокристаллах [6, 7], а также пластическую деформацию монокристаллов алюминия [8].

Большая часть опубликованных работ, посвященных моделированию наноиндентирования, направлена на определение механических свойств [5–6]. Модель применяют для проверки гипотезы о частично отобранных правилах зародышеобразования при пластической деформации [9]. При использовании квазинепрерывного метода были выявлены микромеханизмы, влияющие на результаты, получаемые при наноиндентировании в тонких пленках, которые зависят от геометрии наноиндентора и ориентации материала [12]. С

помощью численного моделирования установлено, что макроскопическое поведение пластической неустойчивости, обусловленное эффектом Портевена – Ле Шателье, определяется коллективными процессами, связанными с дальнедействующим взаимодействием дислокаций, приводящими к динамическим эффектам мезоскопического масштаба [13].

Визуализация изменения положений атомов материала при наноиндентировании позволила бы дополнить имеющиеся работы в этой области.

Целью данной работы является разработка компьютерной модели, использующей метод молекулярной динамики и позволяющей визуализировать изменение структуры материала в процессе внедрения в него наноиндентора.

ОБЪЕКТ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве объекта моделирования выбран аргон, обладающий достаточно простыми и изученными свойствами, что позволило использовать его для аналогичных целей в ряде работ [14, 16]. Основные параметры аргона, используемые в модели, приведены в табл. 1. Здесь σ – межатомное расстояние. Параметр ϵ имеет размерность энергии и равен минимуму потенциальной энергии при $r_0 = 2^{1/6} \sigma$. Масса аргона $6,69 \cdot 10^{-23}$ г. Моделируемый объект в нормальных условиях представляет собой газ, но при температуре ниже 80–90 К переходит в твердое состояние.

Таблица 1

Теоретические и экспериментальные значения параметров, характеризующих потенциал Леннарда – Джонса и энергии сцепления Ar [17]

Кри- сталл	$\sigma \cdot 10^{-1}$, нм (эксп.)	$r_0 \cdot 10^{-1}$, нм		ϵ , эВ (эксп.)	$U_0 = -8,6\epsilon$, эВ (теор.)	U_0 , эВ (эксп.)
		(эксп.)	(теор.)			
Ar	3,40	3,75	3,71	0,0104	-0,089	-0,08

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

При разработке модели приняты следующие основные допущения:

1. Атомы представляют собой несжимаемые шарики.
2. Рассматривается двумерный случай. Такая ситуация может иметь место, например, в тонких пленках.
3. Наноиндентор представляет собой прямоугольный треугольник (пирамидальный индентор).
4. Динамика движения атомов подчиняется классическим законам Ньютона.
5. Сила тяжести на несколько порядков меньше силы взаимодействия между атомами, и ею можно пренебречь.
6. Усредненная температура модельной области в отдельном вычислительном эксперименте постоянна.
7. Стенки модельной области являются абсолютно упругими.
8. Соударения атомов со стенками и с наноиндентором – абсолютно упругие.
9. Силовое взаимодействие между всеми атомами является ван-дер-ваальсовым.

Модель, построенная с учетом принятых допущений, представляет собой квадратную плоскую область с расположенными на ней $14 \times 14 = 196$ атомами, заданными координатами центров. Координаты всех атомов и среднеквадратичная скорость их движения в начальный момент времени задаются исследователем. Направления движения атомов в начальный момент времени рандомизированы. Температура модельной области вычисляется по уравнению

$$T = \frac{\sum \frac{1}{2} \langle m \cdot v_i^2 \rangle}{\frac{1}{2} N k_B},$$

где k_B – постоянная Больцмана, N – количество атомов, m – масса атома, v_i – скорость, скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по времени.

Потенциальная энергия взаимодействия двух частиц описывается с помощью потенциала Леннарда –

$$\text{Джонса, } U = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \text{ где } r_{ij} - \text{расстояние}$$

между i и j атомами соответственно.

Для удобства в модели выражали длины, энергию и массу в единицах σ , ϵ , m , где m – масса частиц.

Скорости измеряли в единицах $\left(\frac{\epsilon}{m} \right)^{1/2}$, а время – в

единицах $\tau = (m \cdot \sigma^2 \cdot \epsilon)^{1/2}$ – модельное время. Используя табл. 1, получили $\tau = 1,82 \cdot 10^{-12}$ с.

В процессе моделирования координаты всех атомов и их скорости изменяются в соответствии с системой разностных уравнений, представляющих собой алгоритм Верле в скоростной форме [16]:

$$x_{n+1} = x_n + \vartheta_n \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot a_n \cdot (\Delta t)^2$$

$$\vartheta_{n+1} = \vartheta_n + \frac{1}{2} \cdot (a_{n+1} + a_n) \cdot \Delta t,$$

здесь новая координата x_{n+1} вычисляется с использованием не только скорости ϑ_n , но и ускорения a_n , т. е. алгоритм обладает высоким порядком по Δt (глобальная погрешность имеет третий порядок для координаты и второй порядок для скорости); новая координата используется для нахождения нового ускорения a_{n+1} , которое вместе с a_n используется для получения новой скорости ϑ_{n+1} . Данный алгоритм является самостартующим.

Правильность и надежность данного алгоритма предварительно тестировали на задачах качественного соответствия модели поведению реального объекта при броуновском движении и фазовых переходах.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В компьютерных экспериментах по определению структуры моделируемого вещества в твердом состоянии начальную температуру системы и скорость всех частиц принимали равными нулю (см. рис. 1а).

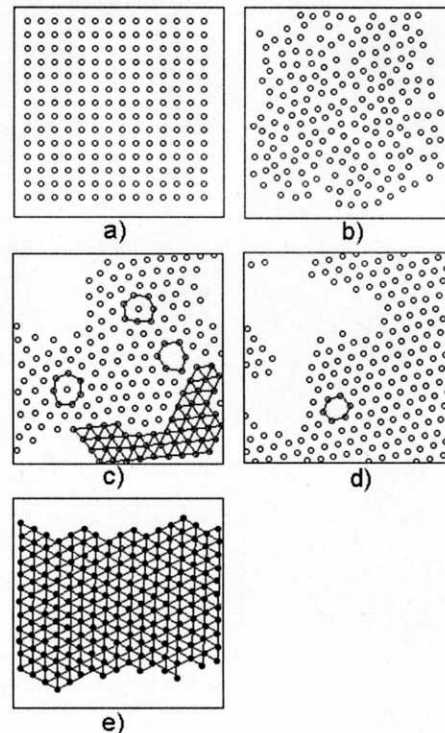


Рис. 1. Визуализация вычислительного эксперимента: а) начальное состояние объекта – кристалл с идеальной квадратной решеткой; б) исследуемый объект находится в газообразном состоянии; в) структура объекта при сверхбыстром охлаждении – моделируемое вещество «распадается» на три фазы: кристаллическую, аморфную и фазу свободного объема; д) структура объекта при медленном охлаждении – кристалл с вкраплением аморфной фазы и фазы свободного объема; е) объект в твердом состоянии

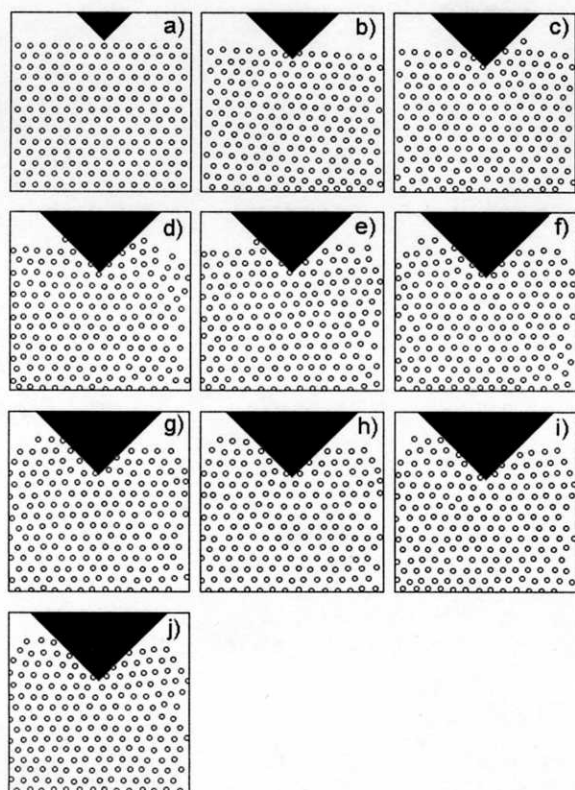


Рис. 2. Визуализация компьютерного эксперимента: изменение структуры моделируемого объекта при постоянной нагрузке

Первая серия вычислительных экспериментов была направлена на определение качественного соответствия основной феноменологии, характерной для известных веществ и результатов моделирования. В начальный момент времени атомы помещали в узлы идеальной квадратной решетки, а их скорости принимали равными нулю, что соответствовало 0 K (рис. 1a). Несмотря на то, что такое начальное состояние не соответствует никакому реальному случаю, оно выбрано в качестве исходного по двум причинам: в ходе экспериментов было отмечено, что рассматриваемая система практически «не запоминает» начального состояния, а последующие структуры объектов зависят лишь от условий взаимодействия атомов между собой и со стенками модельной области; удобство проведения вычислительного эксперимента и задания начальных условий.

В дальнейшем скорость движения атомов линейно увеличивали со временем, что соответствовало «нагреву» объекта, так что положение атомов через некоторое время имело вид, показанный на рис. 1b. Видно, что в результате «нагрева» объект из состояния (рис. 1a), характеризующегося упорядоченной структурой, перешел в состояние (рис. 1b), характеризующееся рандомизированной структурой, что соответствует переходу вещества в газообразное состояние. Из этого состояния вещество подвергали «сверхбыстрому охлаждению». В модели это соответствовало уменьшению скорости движения частиц на каждом шаге модельного времени. Через некоторое время система переходит в состояние, показанное на рис. 1c, – «распадается» на

три фазы: кристаллическую, аморфную и фазу свободного объема, что в соответствующих условиях наблюдается и для реальных веществ.

Из состояния газа (рис. 1b) осуществляли также «медленное охлаждение» – его скорость была в 20 раз меньше, чем при быстром охлаждении. При таком воздействии объект через некоторое время приходит в состояние, показанное на рис. 1d, – кристалл с вкраплением аморфной фазы и фазы свободного объема. Когда систему атомов изолируют от внешних воздействий, т. е. предоставляют самой себе, то она переходит из первоначального состояния, показанного на рис. 1a, в состояние (рис. 1e) с треугольной решеткой. Это объясняется тем, что вещество в неравновесном состоянии стремится занять положение с минимальной потенциальной энергией.

Приведенные предварительные вычислительные эксперименты показали, что компьютерная модель правильно описывает основную феноменологию, наблюдающуюся в реальных объектах, что позволило использовать ее для исследований процессов наноиндентирования.

В следующих компьютерных экспериментах среднюю скорость движения атомов в модели поддерживали постоянной, что соответствует постоянству температуры модельной области.

Во второй серии вычислительных экспериментов моделировался процесс наноиндентирования, в котором испытательная нагрузка была постоянной. В начальный момент времени атомы помещали в узлы идеальной треугольной решетки (рис. 2a). При внедрении наноиндентора атомы, которые находятся под ним,

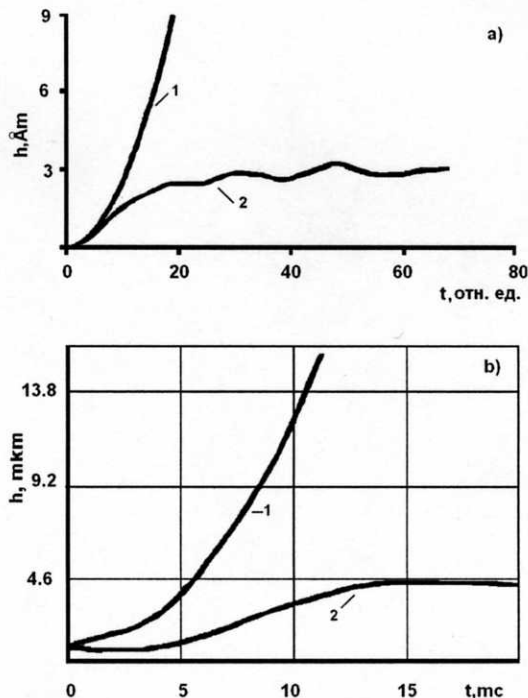


Рис. 3. Кинетика перемещения наноиндентора при постоянной нагрузке. Без образца (1) и с образцом (2): а) вычислительный эксперимент; по оси абсцисс – модельное время в относительных единицах; по оси ординат – глубина погружения наноиндентора; б) данные, полученные при микроиндентировании HCl на экспериментальной установке [2]

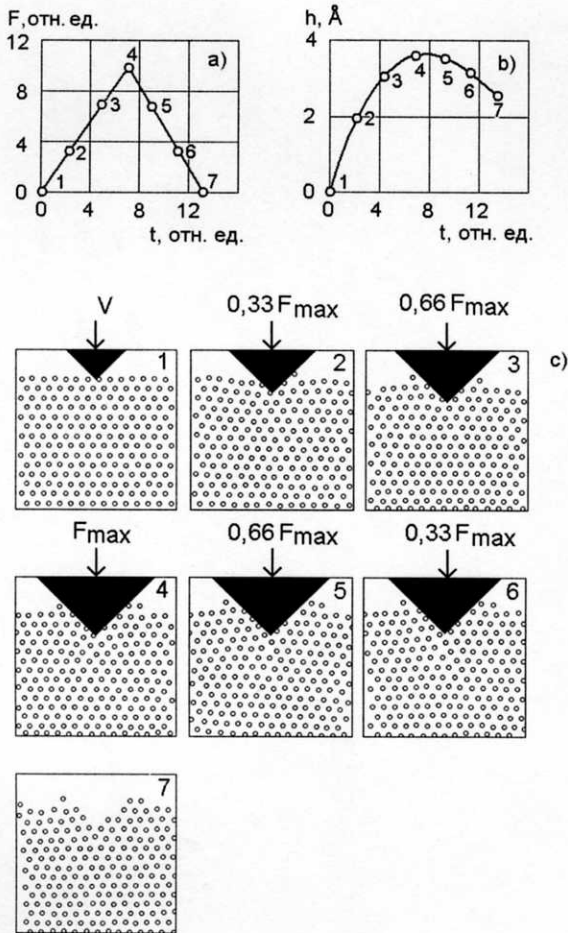


Рис. 4. Визуализация виртуального эксперимента при переменной нагрузке (метод кинетической твердости): а) – зависимость нагрузки от времени; б) – зависимость глубины погружения индентора от времени; в) – изменение структуры моделируемого объекта (цифры 1–7 соответствуют точкам на графиках а, б)

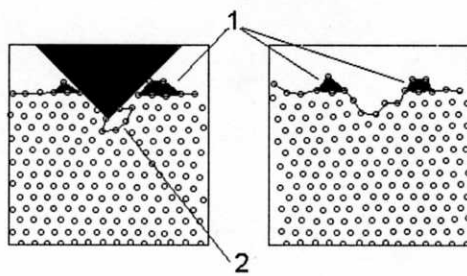


Рис. 5. Области образования навалов (1) и разрыхления (2)

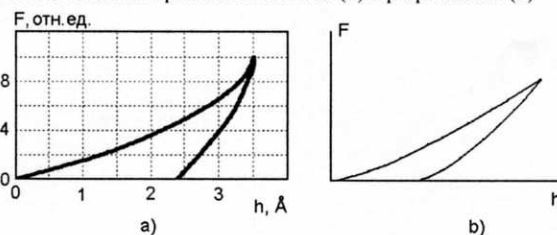


Рис. 6. Зависимости нагрузка – глубина проникновения наноиндентора при нагружении и разгрузке: а) в компьютерном эксперименте; б) в реальных условиях для ZnO_2 [2]

перемещаются на поверхность, образуя так называемые «навалы» (рис. 2с – 2j). В процессе моделирования получены рисунки, из которых видно, что в объеме примыкающие к наноиндентору атомы уплотняются (рис. 2с – 2j), т. е. появляются межузельные атомы, а в зоне острия наноиндентора образуются области разрыхления (рис. 2е, 2г, 2h), т. е. вакансии; в основной же части структура материала не изменяется (рис. 2б – 2j).

В реальных твердых телах при таких же условиях обычно появляются дислокации, которые при моделировании не обнаруживаются. По всей видимости, это можно связать с тем, что в вычислительном эксперименте рассматривалось малое число частиц; наноиндентор погружался только на несколько атомных слоев.

В этих же вычислительных экспериментах регистрировалась глубина погружения индентора во времени. Полученный график $h(t)$ (рис. 3а) имеет качественное сходство с экспериментальными зависимостями, полученными при индентировании HCl (рис. 3б) [2].

Из графика (рис. 3а) видно, что при прекращении погружения наноиндентора он окончательно не останавливается, а совершает затухающие колебания относительно положения равновесия. В реальных системах данное явление не зафиксировано из-за существенно большего различия масс наноиндентора и моделируемого материала.

Третью серию компьютерных экспериментов проводили с использованием метода кинетической твердости [2].

На рисунках показано изменение структуры моделируемого вещества (рис. 4с). Из них видно, что при внедрении наноиндентора образуются «навалы» (рис. 4с) (2–7) и рис. 5 (1), а у кончика наноиндентора – область разрыхления (рис. 4с) (4) и рис. 5 (2), которая постепенно исчезает при снятии нагрузки (рис. 4с) (7). В основной же части кристалла расположение атомов не изменилось (рис. 4с) (1–7).

Получены также зависимости приложенной силы и глубины внедрения наноиндентора от времени $F(t)$ (рис. 4а) и $h(t)$ (рис. 4б)) и изменения нагрузки от погружения наноиндентора $F(h)$ (рис. 6а). График, показанный на рис. 6а, имеет вид, качественно схожий с экспериментальными данными (рис. 6б).

Таким образом, полученные результаты моделирования оказались непротиворечивыми по отношению к экспериментальным исследованиям процессов наноиндентирования, проведенным ранее другими авторами. Данную модель можно использовать для объяснения феноменов, характерных для этого процесса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Oliver W.C., Pharr G.M. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments // J. Mater. Research. 1992. V. 7. № 6. P. 1564–1583.
2. Головин Ю.И., Иволгин В.И., Коренков В.В., Коренкова Н.В., Рябко Р.И. Определение комплекса механических свойств материалов в нанообъемах методами наноиндентирования // Конденсированные среды и межфазные границы. 2001. Т. 3. № 2. С. 122–135.
3. Головин Ю.И., Тюрин А.И. Недислокационная пластичность и ее роль в массопереносе и формировании отпечатка при динамическом индентировании // ФТТ. 2000. Т. 42. № 10. С. 1818–1820.
4. Головин Ю.И., Тюрин А.И. Современные проблемы нано- и микротвердости твердых тел. Тамбов: Изд-во ТГУ, 2000. 42 с. (Препринт.)

5. Дмитриев С.В., Овчаров А.А., Старостенков М.Д., Козлов Э.В. Механизм перехода однородного кристалла аргона // ФТТ. 1996. Т. 38. Вып. 6. С. 1805-1811.
6. Шудегов В.Е., Лобастов А.И., Лихачев В.А. и др. Процессы зарождения дефектов в монокристаллах // ФТТ. 1995. Т. 65. Вып. 6. С. 94-101.
7. Лобастов А.И., Шудегов В.Е., Чудинов В.Г. Процессы зарождения дефектов в монокристаллах // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 12. С. 100-102.
8. Лобастов А.И., Шудегов В.Е., Чудинов В.Г. Пластическая деформация монокристаллов алюминия в компьютерном эксперименте // ЖТФ. 2000. Т. 70. Вып. 4. С. 123-127.
9. Robertson C.F., Fivel M.C. A study of the submicron indent-induced plastic deformation // J. of Mater. Research. 1999. V. 14. № 6. С. 2251-2257.
10. Лагунов В.А., Синанин А.Б. Образование биструктуры твердого тела в компьютерном эксперименте // ФТТ. 1998. Т. 40. Вып. 10. С. 1919-1925.
11. La Fontaine W.R., Yost B., Black R.D., Li C.Y. Indentation load relaxation experiment with indentation depth in the submicron range // J. of Mater. Research. 1990. V. 5. № 10. P. 2100-2106.
12. Tadmor E.B., Miller R., Phillips R., Ortiz M. Nanoindentation and incipient plasticity // J. of Mater. Research. 1999. V. 14. № 6. С. 2233-2249.
13. Лебедев М.А., Дунин-Барковский Л.Р. Динамический механизм температурной зависимости эффекта Портевена – Ле Шателье // ФТТ. 1998. Т. 40. № 3. С. 487-492.
14. Лагунов В.А., Синанин А.Б. Компьютерное моделирование формирования кристаллической структуры при переходе из аморфного состояния // ФТТ. 2000. Т. 42. Вып. 10. С. 1087-1091.
15. Дмитриев С.В., Овчаров А.А., Старостенков М.Д., Козлов Э.В. Механизм перехода однородного кристалла аргона // ФТТ. 1996. Т. 38. Вып. 6. С. 1805-1811.
16. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: В 2 ч. Ч. 1: Пер. с англ. М.: Мир, 1990. 349 с.
17. Bernardes N. // Phys. Rew. 1958. V. 112. P. 1534.

Поступила в редакцию 22 сентября 2003 г.