

УДК 538.935

ПРИМЕНЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ В ОБЛАСТИ КОНТАКТА СВАРИВАЕМЫХ МЕТАЛЛОВ

А.Н. Гостевская, А.В. Маркидонов

E-mail: gostevskaya_an@mail.ru

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

Аннотация. Изучение структуры на нанометровом уровне при помощи практических экспериментов затруднено из-за малых размеров частиц. Использование компьютерного моделирования высокотемпературных воздействий на атомные преобразования структуры объемноцентрированной кубической решетки (ОЦК) кристалла дает возможность изучать и проводить исследования, которые трудно и дорого решать экспериментально. В таком случае более рациональным является метод компьютерного моделирования. Существует множество методов моделирования, которые дают возможность исследовать свойства и структуру материала на молекулярном уровне. В настоящей работе использован метод молекулярной динамики, при помощи которого возможно предсказать изменение структуры и свойств при влиянии высоких температур. Проведен обзор исследований различных процессов соединения материалов и их атомов при помощи разных видов сварки в атомарном масштабе.

Ключевые слова: наноструктура, математические модели, молекулярно-динамическое моделирование

APPLICATION OF MOLECULAR DYNAMICS MODELING IN STUDY OF PROCESSES OCCURRING IN THE CONTACT AREA OF WELDED METALS

A.N. Gostevskaya, A.V. Markidonov

E-mail: gostevskaya_an@mail.ru

Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia

Abstract. Studying structure at nanometer level through practical experimentation is challenging due to the small particle size. The use of computer simulation methods for studying high-temperature effects on atomic mechanisms of transformation of the structure of a bcc crystal makes it possible to study problem that is difficult and expensive to solve by experimental methods. In this case, method of computer modeling is more rational. Purpose of the work is to study high-temperature effect on change in structure of the bcc metal crystal at the nanoscale level. Currently, many modeling methods are used that make it possible to study properties and structure of material at molecular level. In this study, molecular dynamics method was used. Using this method, it is possible to predict change in structure and properties when exposed to high temperatures. In the course of study, it was found that molecular dynamics modeling method has its advantages for simulating various joining processes using different types of materials on an atomic scale. Practical significance lies in study of the effect of high temperatures on metals and their alloys, which affect processes of structural restructuring at the atomic level, which makes it possible to use high temperatures for carrying out welding processes.

Keywords: nanostructure, mathematical models, molecular dynamics modeling

Экспериментальное исследование наноструктуры затруднительно из-за малых размеров изучаемых объектов. В связи с этим для исследования воздействий высоких температур на атомарные структуры объемно-центрированного и гранецентрированного кристаллов (ОЦК и ГЦК)

применяются методы компьютерного моделирования [1]. Это дает возможность изучить вопрос, решение которого экспериментальными методами требует больших материальных затрат. В этом случае метод компьютерного моделирования является наиболее рациональным.

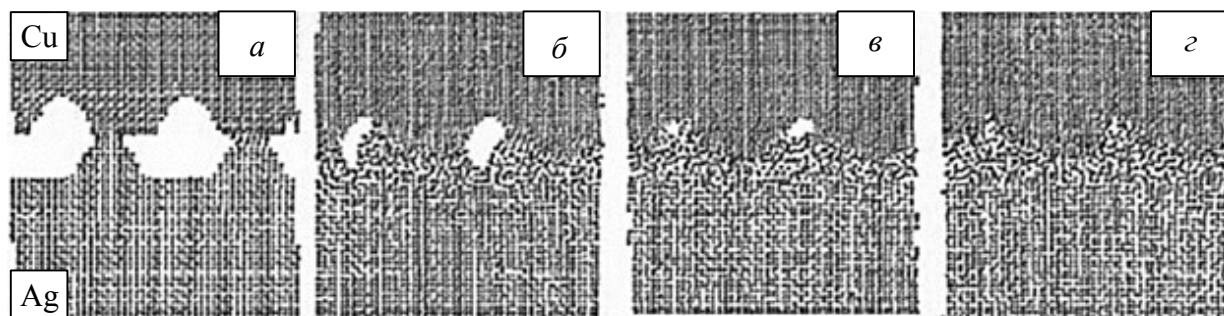


Рис. 1. Модель системы Cu – Ag с учетом влияния изменения температуры при постоянном давлении 20 МПа:
а – 1 К; б – 200 К; в – 300 К; г – 400 К

С помощью модели, построенной методом компьютерного моделирования, проводят теоретические исследования, объясняющие и прогнозирующие явления, которые еще не изучены другими методами. Компьютерное моделирование позволяет получать данные с относительно малыми затратами времени и средств [1].

На сегодняшний день существуют различные виды компьютерного моделирования, позволяющие изучить свойства и структуру материала на наноуровне. До сих пор у исследователей пользуется высоким спросом метод классической молекулярной динамики, разработанный еще в 50-е гг. XX в. Основная идея этого метода заключается в том, что поведение системы взаимодействующих частиц описывается с помощью системы дифференциальных уравнений движения Ньютона [2, 3].

Проводимые молекулярно-динамическим методом исследования помогают решать такие вопросы, как установление связи между частицами в структуре ОЦК кристалла, исследование влияния температуры на изменение термодинамических свойств металлов и видоизменение структуры.

Изучение на наномасштабном уровне процессов и механизмов, лежащих в основе соединения материалов, будет способствовать более глубокому пониманию этого явления. Метод молекулярной динамики может оказаться хорошим подспорьем.

Разработка метода молекулярной динамики для изучения процесса соединения велась на протяжении десятилетия. Такое моделирование обеспечивает новое понимание различных процессов соединения в наномасштабе. Например, качество соединения определяется достигнутыми механическими свойствами, которые можно оценить с помощью молекулярно-динамического моделирования [2, 3].

Такой метод имеет некоторые существенные ограничения, например, относительно размеров моделируемой системы или временных масштабов. Тем не менее при исследовании соединений наноструктурных объектов (таких как нанотрубки

и нанопроволоки) метод молекулярной динамики имеет большой потенциал.

В настоящей работе проведен анализ процессов сварки материалов, выполненных при помощи метода молекулярной динамики.

На сегодняшний день по сварке диффузионным методом проведено много теоретических и экспериментальных исследований [4, 5], часть из них выполнена на микромасштабном уровне, а он не позволяет в полной мере изучить механизмы диффузии атомов и поведения границы раздела.

Молекулярно-динамическое моделирование позволяет провести изучение поведения атомарной структуры металлов [6]. Лу Т. и другие изучали диффузию поведения водорода в ОЦК кристалле железа с точечными дефектами [7].

Изучение диффузионной сварки ведется уже несколько десятков лет. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет уменьшить затраты на подготовку образцов. Чен С.Д. и другие соавторы изучали процессы стыковки диффузионной сваркой [8]. В их первой модели рассматривается воздействие давления на межфазную зону. В этом исследовании выявлено, что толщина межфазной зоны изменяется в зависимости от давления. В ходе исследований С.Д. Чен отследил поведение всей системы при различных температурах (рис. 1).

Результаты исследования [8] показали, что толщина межфазной области также зависит от температуры (рис. 1) [9]. Показано, что толщина межфазной границы при температуре ниже 400 К ступенчато увеличивается со временем (рис. 1). При увеличении давления толщина границы увеличивается равномерно (рис. 2). Из этого исследования видно, что толщина межфазной области зависит не только от температуры, но и от давления.

Исследователь С. Ли выполнил моделирование молекулярной динамики на материале Cu – Al. В работе С. Ли с соавторами [10] сосредоточились на атмосферном давлении и показали, что атомам алюминия труднее диффундировать по сравнению с медью из-за различных температур плавления. Установлено, что подходящим

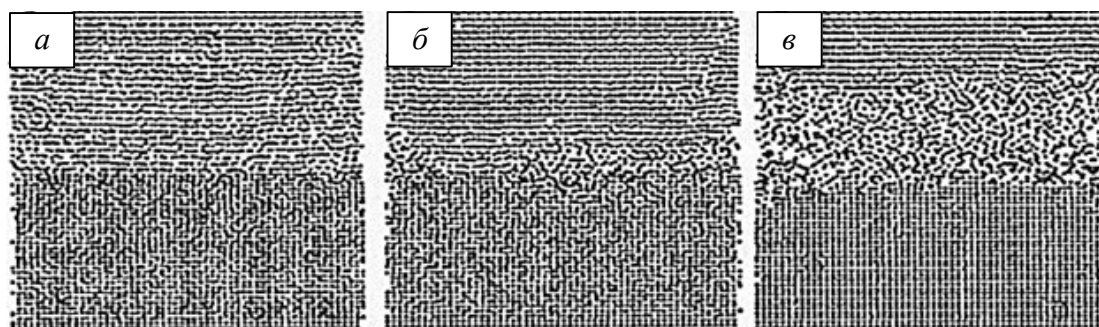


Рис. 2. Модель системы Cu – Ag при температуре 750 K:
а – 50 МПа; б – 100 МПа; в – 150 МПа

температурным диапазоном для диффузионного связывания границы раздела Cu – Al является 750 – 800 K, а энергии активации диффузии алюминия и меди составляют 0,77 и 0,50 эВ соответственно [8].

Еще одним видом соединения твердых тел является сварка взрывом, требующая большого количества энергии. Во время взрыва вблизи стыка материалов происходит преобразование кинетической энергии в тепловую. Так как сварка взрывом осуществляется за очень короткое время, то натурное наблюдение всех явлений и процессов, протекающих при этом, весьма затруднительно. В этом случае, как и в случае диффузионной сварки, применение метода молекулярной динамики позволяет провести исследование на атомном уровне. Компьютерное моделирование и применение математических моделей для решения динамических задач механики взрыва значительно упрощает поиск ответов на теоретические и практические задачи. Предварительный прогноз позволяет выбрать рациональную технологическую схему для достижения желаемого результата.

Целью исследования [11] является объяснение механизма образования и эволюции нанозернистого трибоматериала при высоких скоро-

стях воздействия. Проведенное моделирование показало хорошее совпадение результатов с экспериментами, в частности, образование неупорядоченного и наноструктурированного поверхностного слоя. В этом исследовании рассматривается возможность использования молекулярно-динамического моделирования в качестве дополнительного объяснения экспериментальных результатов. Также оно может использоваться в качестве основного исследования и послужить основой дальнейшего изучения процесса сварки взрывом.

Авторы работы [12] обнаружили, что структура материала сразу после процесса связывания становится нанокристаллической с размером кристаллов 10 – 20 нм, что согласуется с экспериментальными данными.

Работа [13] посвящена исследованию диффузии атомов при сварке взрывом системы металлов Cu – Al. На рис. 3 показана конфигурация плоскостей Cu – Al при различной скорости диффузии меди. Установлено, что коэффициенты диффузии зависят от скорости столкновения моделируемых кристаллов, при этом более высокие скорости создают большие коэффициенты. В случае отсутствия поперечной скорости

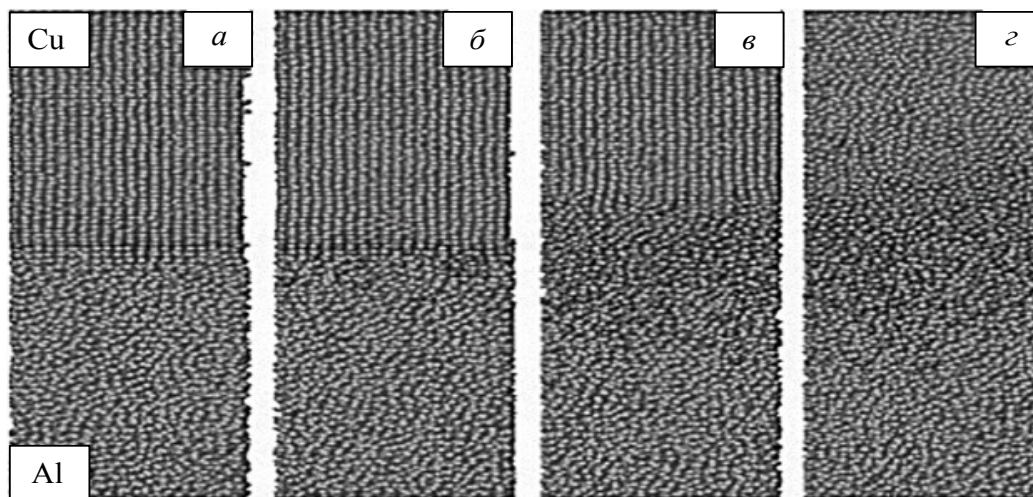


Рис. 3. Конфигурация плоскостей Cu – Al при различных скоростях диффузии меди:
а – 100 м/с; б – 300 м/с; в – 500 м/с; г – 700 м/с

коэффициент диффузии прямо пропорционален радиальной скорости, а при фиксированной радиальной скорости коэффициент диффузии пропорционален квадрату поперечной скорости. Толщина диффузионного слоя, рассчитанная по результатам моделирования, хорошо согласуется с экспериментальными данными.

В работе [14] исследовали диффузию атомов на границе раздела Al – Mg. Моделирование показало, что коэффициент диффузии атома магния больше, чем у атома алюминия, и разница между этими коэффициентами становится меньше с увеличением скорости столкновения кристаллов. Также установлено, что коэффициент диффузии зависит от скорости и угла столкновения.

Молекулярно-динамическое моделирование диффузии атомов в процессе сварки взрывом системы Ni – Ti – Cu проведено в работе [15]. Результаты показывают, что кривые распределения концентраций в разное время имеют геометрическое сходство. По геометрическому подобию можно рассчитать распределение концентрации атомов в любой момент времени при сварке взрывом. Результаты моделирования и эксперимента хорошо согласуются.

Выводы

Моделирование методом молекулярной динамики позволяет заполнить пробел между теоретическим вычислением и экспериментальными результатами. Моделирование продемонстрировало свои преимущества для изучения различных процессов соединения разными видами сварки с различными материалами на атомном масштабном уровне.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Маркидонов А.В. Механизмы кооперативного воздействия групп атомов на структурные изменения в ГЦК-металлах при внешних высокоинтенсивных воздействиях: автореф. дисс. ... докт. физ.-мат. наук: 01.04.07: Барнаул, 2016. – 36 с.
2. Бесогонов В.В., Андреев В.В., Андреев В.В. Определение временного шага интегрирования при моделировании лазерного воздействия на металлы методом молекулярной динамики // Химическая физика и мезоскопия. 2009. Т. 11. № 2. С. 159 – 165.
3. Андреев В.В., Андреев В.В. Определение наиболее эффективного метода параллельной обработки при решении задач методом молекулярной динамики // Химическая физика и мезоскопия. 2010. Т. 12. № 4. С. 458 – 466.
4. Rieth M. Diffusion weld study for Test Blanket Module fabrication // Fusion Engineering and Design. 2009. Vol. 84. No. 7. P. 1602 – 1605.
5. Kolmogorov V.L., Zalazinsky A.G. On metal joining and the prediction of the strength of solid-phase joints // Journal of Materials Processing Technology. 1998. Vol. 75. No. 1. P. 157 – 164.
6. Soltani S., Abdolrahim N., Sepehrband P., Molecular dynamics study of self-diffusion in the core of a screw dislocation in face centered cubic crystals // Scripta Materialia. 2017. Vol. 133. P. 101 – 104.
7. Lu T., Niu G., Xu Y. et al. Molecular dynamics study of the diffusion properties of H in Fe with point defects. // Fusion Engineering and Design. 2016. Vol. 113. P. 340 – 345.
8. Chen S.D., Ke F.J., Zhou M. Atomistic investigation of the effects of temperature and surface roughness on diffusion bonding between Cu and Al // Acta Materialia. 2007. Vol. 55. No. 9. P. 3169 – 3175.
9. Chen S.D., Soh A.K., Ke F.J. Molecular dynamics modeling of diffusion bonding // Scripta Materialia. 2005. Vol. 52. No. 11. P. 1135 – 1140.
10. Li C., Li D., Tao X. et al. Molecular dynamics simulation of diffusion bonding of Al – Cu interface // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering Eng. 2014. Vol. 22. No. 6. P. 065002.
11. Kim H.J., Emgea A., Winter R.E. et al. Nanostructures generated by explosively driven friction: Experiments and molecular dynamics simulations // Acta Materialia. 2009. Vol. 57. No. 17. P. 5270 – 5282.
12. Saresoja O., Kuronen A., Nordlund K. Atomistic simulation of the explosion welding process // Advanced Engineering Materials. 2012. Vol. 14. No. 4. P. 265 – 268.
13. Chen S.Y., Wu Z.W., Liu K.X. et al. Atomic diffusion behavior in Cu – Al explosive welding process // Journal of Applied Physics. 2013. Vol. 113. No. 4. P. 6.
14. Zhang T.-T., Wang W.-X., Zhou J. et al. Molecular Dynamics Simulations and Experimental Investigations of Atomic Diffusion Behavior at Bonding Interface in an Explosively Welded Al/Mg Alloy Composite Plate // Acta Metallurgica Sinica (English Letters). 2017. Vol. 30. No. 10. P. 983 – 991.
15. Shi-yang C., Zhen-wei W., Kai-xin L. Atomic diffusion across Ni 50 Ti 50 Cu explosive welding interface: Diffusion layer thickness and atomic concentration distribution // Chinese Physics B. 2014. Vol. 23. No. 6. P. 1 – 6.

© 2021 г. А.Н. Гостевская, А.В. Маркидонов

Поступила 2 марта 2021 г.