

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

На правах рукопису

Розрахунок механічних властивостей нанокompозитів на основі Al-SiC

Галузь знань: 10 Природничі науки
Спеціальність: 104 Фізика та астрономія
Освітня програма: Фізика

Кваліфікаційна робота бакалавра
студента 4 курсу
Пучканьова Дмитра Андрійовича

Науковий керівник:
к. ф.-м. н., доцент
Курилюк Василь Васильович

Робота заслухана на засіданні кафедри фізики металів
та рекомендована до захисту на ЕК, протокол № від 2020 р.

Завідувач кафедри

проф. Макара В.А.

Київ – 2020

ВИТЯГ

з протоколу № _____
засідання Екзаменаційної комісії

Визнати, що студент _____ виконав та захистив
кваліфікаційну роботу бакалавра з оцінкою _____.

Голова ЕК _____

«_____» _____ 2020 р.

АНОТАЦІЯ

Пучканьов Д.А. Розрахунок механічних властивостей нанокompозитів на основі Al-SiC.

Кваліфікаційна робота бакалавра за напрямом підготовки 6.040203 Фізика, спеціалізація «Фізика наноструктур в металах та кераміках». – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, кафедра молекулярної фізики. – Київ – 2020.

Науковий керівник: к. ф.-м. н., доц. Курилюк В.В., доц. каф. фізики металів.

Методом молекулярної динаміки з використанням емпіричних потенціалів MEAM та Vashishta проведено розрахунки концентраційних та температурних залежностей механічних властивостей нанокompозитів на основі Al/SiC. Отримані результати показують, що модуль Юнга та модуль зсуву композитів змінюються з температурою, тоді як модуль об'ємного стиснення майже не залежить від температури. Показано, що модуль Юнга, модуль зсуву та модуль об'ємного стиснення нанокompозитів Al/SiC збільшуються з ростом об'ємної частки наночастинок SiC.

Ключові слова: нанокompозит, механічні властивості, метод молекулярної динаміки.

SUMMARY

Puchkaniov D.A. Calculations of mechanical properties of Al-SiC based nanocomposites.

Bachelor qualification work in the direction 6.040203 Physics, specialization «Physics of nanostructures in metals and ceramics». – Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics, Department of Molecular Physics. – Kyiv – 2020.

Research supervisor: Dr. of Physics and Mathematics, as.prof. Kuryliuk V.V., as.prof. of Department of Metal Physics.

Molecular dynamics simulations using the MEAM and Vashishta empirical potentials are employed to study the effects of SiC nanoparticles concentration and temperature on mechanical properties of Al/SiC nanocomposites. The obtained results show that the temperature has an obvious effect on shear and Young's modulus of Al/SiC nanocomposites, while bulk modulus is temperature independent. It is shown that the Young's modulus, bulk modulus and shear modulus of the Al/SiC nanocomposites increase with an increase in the volumetric ration of SiC nanoparticles.

Key words: nanocomposite, mechanical properties, molecular dynamics.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	2
I.ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД	3
1.1. Фізичні властивості алюмінію.....	3
1.2. Фізичні властивості карбіду кремнію	4
1.3. Механічні властивості композиційних матеріалів на основі Al та SiC	5
1.4. Криві напруження-деформація як інструмент дослідження механічних властивостей матеріалів.....	8
II.МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ.....	12
2.1. Метод молекулярної динаміки для розрахунку механічних властивостей матеріалів.....	12
2.2. Потенціали міжатомної взаємодії в системі Al/SiC.....	13
2.4. Методика розрахунку механічних характеристик нанокompозитів Al/SiC	15
III.РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ	19
3.1. Тестування потенціалів міжатомної взаємодії для опису механічних властивостей в системі Al/SiC	19
3.2. Концентраційні залежності механічних характеристик нанокompозитів Al/SiC	22
3.3. Температурні залежності механічних характеристик нанокompозитів Al/SiC	23
IV.ВИСНОВКИ	26
V.СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	27

ВСТУП

В останні десятиліття наноструктурні матеріали стали основою для низки галузей виробництва, що включають енергетику, мікроелектроніку, військову промисловість, а також є об'єктом досліджень, що привертають увагу науковців. Розвиток досліджень та впровадження наноструктурних матеріалів спричинені набором їх унікальних електронних, оптичних, магнітних, та механічних властивостей.

Особливої ваги в наші дні набувають наноматеріали, що дозволяють їх експлуатацію в екстремальних умовах, зокрема, при високих температурах, тиску та механічних навантаженнях. Серед таких матеріалів виділяються композитні структури на основі легких металів (наприклад, алюмінію) та карбїду кремнію. Високі механічні, термічні і хімічні властивості SiC, сприяють його прикладним застосуванням в численних пристроях і конструкціях. Проте, дослідження матеріалів на основі карбїду кремнію є незавершеними, а фізичні механізми зміни їх механічних властивостей в наноструктурному стані достеменно не з'ясовані.

Одним з інструментів для вивчення фізичних властивостей наноматеріалів на атомарному рівні є методи комп'ютерного моделювання, серед яких окремо виділяється метод молекулярної динаміки. Наприклад, з використанням молекулярної динаміки було досліджено процес деформації наночастинок SiC та показано можливість їх структурної трансформації в процесі навантаження. Шляхом моделювання було виявлено нелінійну залежність пружних модулів від об'ємної частки SiC в нанокомпозитах Cu/SiC.

В даній роботі методом молекулярної динаміки проведено дослідження механічних властивостей нанокомпозитів на основі Al з наночастинками SiC. Змодельовано концентраційні і температурні залежності пружних модулів нанокомпозитів Al/SiC.

І.ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1. Фізичні властивості алюмінію

Алюміній є хімічним елементом періодичної системи елементів з порядковим номером $Z=13$, відносною атомною масою 26.9815385 та електронною конфігурацією $3s^23p^1$. Алюміній в природному стані – це м'який, білий, легкий та надзвичайно блискучий метал (нагадує срібло), що характеризується високими електро- та теплопровідністю, а також світловідбиваючою здатністю. Кристалічний алюміній кристалізується з утворенням гранецентрованої кубічної ґратки. Температура плавлення алюмінію становить 933.47 К (660.32 °С), густина Al дорівнює 2699 кг/м³, питомий електроопір при кімнатній температурі 28.2 нОм·м, а теплопровідність не перевищує 237 Вт/(м·К). Слід врахувати, що домішки можуть суттєво зменшувати електропровідність алюмінію, але при цьому можуть покращувати його механічні властивості [1]. Величина модуля Юнга алюмінію дорівнює 70 ГПа. Твердість алюмінію дорівнює 160—550 МПа за шкалою Брінелля або 2.75 за шкалою Мооса. Властивості алюмінію в значній мірі визначаються наявністю домішок. Зокрема, межа плинності для чистого металу Al лежить в межах 7–11 МПа, а в той же час для його сплавів ця величина може зростати до 200–600 МПа. Відполірований алюміній характеризується найвищою після срібла відбивальною здатністю для видимого та інфрачервоного випромінювання.

Основне застосування алюмінію – це виробництво легких сплавів на його основі. Легуючі домішки, наприклад, мідь, кремній, магній, цинк, манган, вводяться в алюміній здебільшого для підвищення його міцності. Широко розповсюдженими на сьогодні є наступні сплави: дуралюміни – сплави, які містять мідь та магній; силуміни – сплави, в яких основними домішками виступає кремній; магналій – сплави алюмінію з 9.5-11.5 % магнію. Основними перевагами всіх перелічених сплавів алюмінію є їхня мала густина (2.5-2.8 г/см³), висока міцність, корозостійкість, відносно

невисока вартість, легкість одержання та обробки. Алюмінієві сплави знаходять своє використання в авіа-, авто-, судно- та приладобудуванні, в ракетній техніці та низці інших галузей промисловості. За частотою використання сплави алюмінію посідають друге місце після сталі та чугуну.

1.2. Фізичні властивості карбіду кремнію

Карбід кремнію (хімічна формула SiC) зустрічається у природі у вигляді надзвичайно рідкісного мінералу – муссаніту. Порошкоподібний карбід кремнію вперше був отриманий в 1983. На сьогодні цей матеріал використовується як абразивна речовина, напівпровідниковий кристал, чи як штучний дорогоцінний камінь [2]. Відомо близько 250 кристалічних форм карбіду кремнію (поліморфних форм). Всі політипи SiC – це варіації однієї й тієї ж хімічної сполуки SiC, що ідентичні у двох вимірах, але відрізняються у третьому.

Серед фізичних властивостей карбіду кремнію виділимо наступні: густина зерен кристалу з карбіду кремнію $\sim 3.20 \text{ г/мм}^3$, щільність абразивів з SiC становить $1.2\text{-}1.6 \text{ г/мм}^3$ (в залежності від розмірів зерен, розкиду за розміром частинок та їх форми). Твердість карбіду кремнію дорівнює 9,2 за шкалою Мооса, або $3000\text{-}3300 \text{ кг/мм}^2$ за Вікерсом. Ці значення є вищими, ніж для корунду і поступаються лише алмазу та кубічному нітриду бору. Щодо теплових властивостей, то карбід кремнію володіє високою теплопровідністю, низьким коефіцієнтом теплового розширення та високою стійкістю до термічного удару. Тобто SiC за описаними ознаками відноситься до високоякісних вогнетривких матеріалів.

З точки зору електричних властивостей карбід кремнію при кімнатній температурі є напівпровідником. Ширина забороненої зони SiC варіюється з температурою і для конкретного політипу може змінюватися в певному діапазоні в залежності від невизначеності краю оптичного поглинання або

умов вимірювання в різних лабораторіях. Для карбїду кремнію притаманною є електролюмінесценція.

1.3. Механічні властивості композиційних матеріалів на основі Al та SiC

Перспективи використання нанокompозитів на основі Al та SiC в різних галузях виробництва зумовлює інтенсивний розвиток досліджень вказаних матеріалів. При цьому одним з важливих інструментів для вивчення властивостей наноструктурних матеріалів є методи комп'ютерного моделювання, зокрема, метод молекулярної динаміки [3]. Авторами роботи було досліджено механічні властивості та структуру нанокompозитів на основі матриці алюмінію, зміцненої наночастинками SiC. Для опису міжатомної взаємодії було використано модифікований потенціал зануреного атома. Механічні характеристики вивчалися шляхом моделювання процесу одновісного розтягу при постійній швидкості деформації. З отриманих кривих напруження-деформація автори роботи [3] розраховали ефективні модулі пружності нанокompозитів. Виявлено, що метод молекулярної динаміки з використанням періодичних граничних умов дозволяє краще описати механічні властивості матеріалу, ніж, наприклад, метод скінченних елементів, який ґрунтується на наближенні суцільного середовища. Розраховані значення модулів пружності демонструють, що нанокompозит Al/SiC з 1% нановключень карбїду кремнію володіє вищими механічними параметрами, ніж сплав алюмінію Al356. В результаті аналізу структури нанокompозиту, авторами встановлено, що атоми алюмінію мають тенденцію до утворення кластерів навколо поверхні наночастинок SiC з формуванням перехідного граничного шару.

В роботі [4] досліджувались нанокompозити на основі матриці Al, амовані частинками SiC з об'ємним вмістом 1, 2 та 4%. Для характеристики

морфологічних та структурних змін підготовлених композитів використовувались SEM, EDX та XRD методи аналізу. Виявлено, що після двох циклів прокатування, міцність на розрив Al зростає до 149 МПа порівняно з 57 МПа, тобто отриманий Al досяг 161% поліпшення міцності. Вже через п'ять циклів прокатування міцність на розрив досліджуваного матеріалу зростає до 175 МПа. При додаванні 1% наночастинок SiC в матрицю алюмінію було зафіксовано зростання міцності на розтяг до 220 МПа після п'яти циклів прокатування. Збільшення частки SiC до 4% дозволило підняти міцність матеріалу на розрив до 233 МПа, тобто майже 308% поліпшення міцності у відсотковому відношенні.

Фізичний аналіз результатів роботи [4] виявив три основні силові механізми, які відповідають за зміцнення Al та Al-SiC нанокompозитів, серед яких - очищення зерен, неправильна орієнтація зерен та зміцнення SiC. Очищення зерна відбувається під час ранніх циклів прокатування, що сприяє поліпшенню міцності на 161%. Зміцнення SiC сприяє покращенню міцності нанокompозиту на 78%, при додаванні 1% SiC, в той час як це значення збільшується до 101% при збільшенні вмісту SiC до 4%.

В роботі [5] досліджено вплив вмісту нанорозмірних частинок SiC на твердість, зносостійкість, корозійну стійкість нанокompозитів Al/SiC, синтезованих механічним фрезеруванням. Показано, що підвищений вміст SiC зумовлює збільшення твердості нанокompозитів. Спостережуване підвищення стійкості до корозії в нанокompозитах Al/SiC зі збільшенням в них вмісту SiC пояснюється тим, що частинки SiC хімічно не реагують з корозійним розчином. Нанокompозити Al/SiC, порівняно з матеріалом матриці, виявляли більшу зносостійкість і менший коефіцієнт тертя як у сухих, так і в корозійних середовищах. Підвищений вміст SiC у таких нанокompозитах призводив до збільшення сухості ковзання та корозійної зносостійкості, а також до зниження коефіцієнта тертя матеріалу. Втрати корозійного зносу для всіх досліджених зразків у 3% розчині NaCl були

меншими, ніж у випадку сухого ковзання при будь-якому вмісті частинок SiC.

Для прогнозування термопружної та пружно-пластичної поведінки нанокompозитів Al, армованих наночастинками SiC, в роботі [6] було розроблено тривимірну мікромеханічну модель. В рамках моделі розглянуто вплив міжфазної області, яка утворюється внаслідок хімічної взаємодії між наночастинками SiC та матрицею Al, на загальну поведінку нанокompозиту. Було показано, що міжфазна область суттєво впливає на пружно-пластичну криву напруження-деформації нанокompозиту. Було розраховано механічні властивості модельних композитів з інтерфазою і встановлено що вони є значно вищими, ніж в моделі без врахування інтерфазу. Також встановлено три фактори, включаючи об'ємну частку наночастинок SiC, товщину та модуль пружності інтерфазу, що зумовлюють зміцнення нанокompозитів Al. Більше того, показано, що коли діаметр наночастинок SiC зменшується нижче приблизно 150 нм, то подальше його зменшення значно збільшує такі механічні властивості, як модуль пружності та напруження плинності.

Вплив наночастинок SiC на механічні властивості нанокompозитів Al₂O₃/SiC експериментально досліджувався в роботі [7]. Нанокompозити з об'ємним вмістом 3–20 % SiC готували методом гарячого пресування порошкових сумішей при 1740 ° C та 30 МПа в атмосфері Ar. Для дослідження впливу розмірів частинок SiC на механічні властивості та поведінку композитів на зношення були використані два різних порошки SiC із середнім розміром частинок SiC 200 нм та 50 нм. Твердість Віккерса лінійно зростала зі збільшенням вмісту SiC при значному відхиленні від тренду при 3 % SiC. Додавання SiC поліпшувало в'язкість матеріалу при руйнуванні. Нанокompозити Al₂O₃/SiC продемонстрували вагомні переваги щодо поведінки зносу на сухому ковзанні порівняно з монолітним Al₂O₃. Більш високу зносостійкість отриманих композитів автори пов'язують з більш тонкою мікроструктурою, більшою твердістю та зменшенням витягування зерна з матричних зерен глинозему.

Метод молекулярної динаміки був застосований в роботі [8] для вивчення механічних властивостей нанокристалічних композитів Cu/SiC. Результати роботи демонструють, що механічна поведінка композитів є нечутливою до швидкості деформації, коли її значення менше 10^9 с⁻¹. Виявлено, що модуль Юнга та напруження руйнування нелінійно зростають зі збільшенням об'ємної частки SiC. Більш того, авторами отримане критичне значення частки SiC на рівні 0.34, нижче якого нанокompозит демонструє поведінку металу. Переважна більшість дислокацій на гетеромежах Cu/Cu та Cu/SiC нуклеуються на межі поділу та поширюються в матрицю міді. Виявлено також, що межа плинності композитів не змінюється зі зростанням швидкості деформації. При перевищенні частки SiC вище критичної межі, механічні властивості матеріалу домінуючим чином визначаються властивостями карбиду кремнію. Результати роботи [8] показують, що зміцнення матеріалу для отримання вищої міцності та збереження пластичності металевого нанокompозиту реалізується і в нанометровій області. При вмісті частинок карбиду кремнію на рівні 0.34 виявлено різке збільшення міцності композиту через зміну механізмів деформації та руйнування.

1.4. Криві напруження-деформація як інструмент дослідження механічних властивостей матеріалів

Більшість стандартних механічних характеристик матеріалу можна розрахувати за положенням окремих точок на діаграмі розтягу. На практиці механічні властивості твердих тіл визначають за первинними кривими розтягу в координатах навантаження-абсолютне видовження, записаними на діаграмній стрічці випробувальної машини [9]. Для полікристалів різних металів і сплавів все різноманіття цих кривих можна в першому наближенні звести до трьох типів, які показано на рис.1.1.

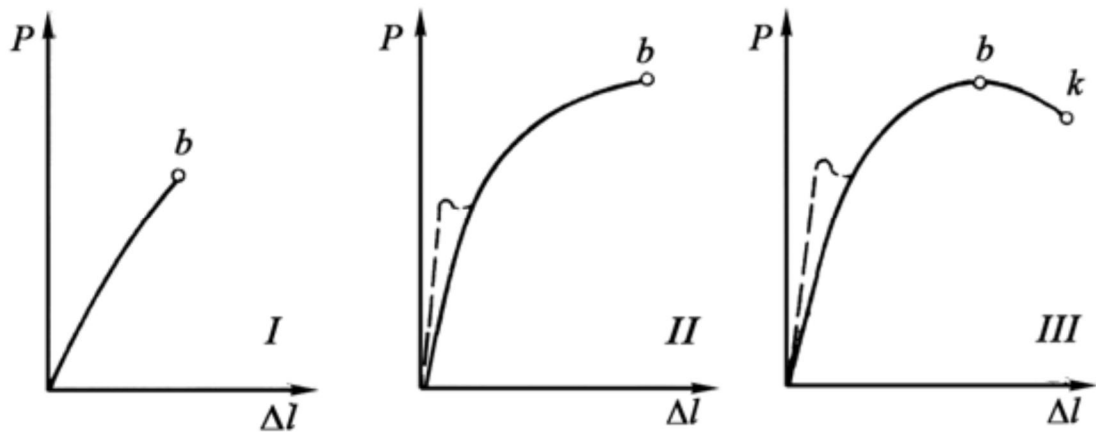


Рис.1.1. Типи діаграм розтягу для твердих тіл

Діаграма розтягу типу I характерна для зразків, які руйнуються без появи помітної пластичної деформації. Діаграма типу II зазвичай отримується в процесі розтягу зразків, які рівномірно деформуються до точки руйнування. Нарешті, діаграма типу III притаманна для зразків, які руйнуються після утворення шийки внаслідок локалізованої деформації. Зростання навантаження до моменту руйнування зразка (діаграма типу II) або до максимуму (діаграма типу III) може бути або плавним (суцільні лінії), або переривчастим. В останньому випадку на діаграмі розтягу можуть виникати «зуб» плинності та ділянка плинності.

В залежності від типу діаграми розтягу змінюється і набір характеристик, які можна по ній розраховувати, а також їх фізичний зміст. На рис.1.2 показано характерні точки, за положенням ординат яких розраховують характеристики міцності. Зазначимо, що не всі вказані точки можуть бути нанесені на діаграмах типів I і II. Розглянемо деякі характерні точки на діаграмах розтягу.

Межа пропорційності ($P_{\text{пц}}$). Навантаження в точці $P_{\text{пц}}$ визначає величину межі пропорційності, тобто максимального напруження, яке матеріал зразка витримує без відхилення від закону Гука. Наближено значення навантаження в цій точці можна визначити по точці, де починається розбіжність кривої розтягу і продовження прямолінійної ділянки. Щоб уніфікувати оцінку межі

пропорційності, його оцінюють як умовне напруження $P_{\text{пц}}$, при якому відхилення від лінійної залежності між навантаженням та видовженням досягає певної величини. Зазвичай допуск при визначенні $P_{\text{пц}}$ задають по зменшенні тангенса кута нахилу, який виникає між дотичною до кривої розтягу в точці p з віссю деформації в порівнянні з тангенсом на початковій пружній ділянці. Стандартна величина допуску складає 50% вказується в значенні границі пропорційності $\sigma_{\text{пц}50}$.

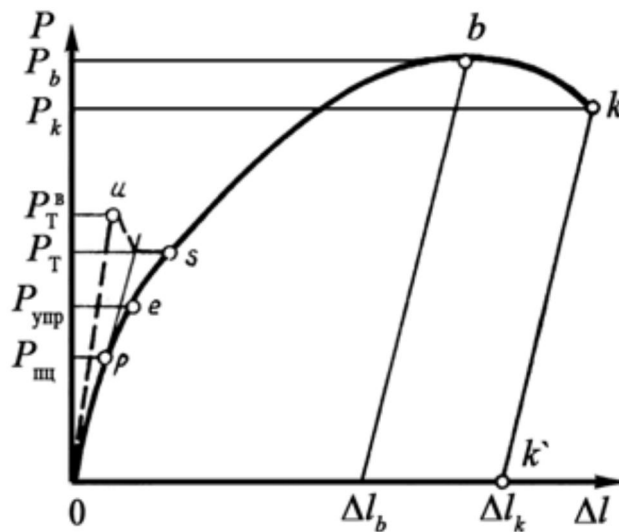


Рис.1.2. Характерні точки для визначення механічних характеристик матеріалів з діаграми розтягу

Наступною характерною точкою на первинній діаграмі розтягу є межа пружності (точка e), якій відповідає навантаження, за яким розраховують умовну межу пружності – максимальне напруження, при якому залишкове видовження досягає заданої величини (зазвичай 0,05%). Межа пружності характеризує механічне напруження, при якому з'являються перші ознаки макропластичної деформації.

Межа плинності. При відсутності на діаграмі розтягу зубу плинності та ділянки плинності, розраховують умовну границю плинності, тобто механічне напруження при якому залишкове видовження досягає заданої величини, як правило, 0.2%. Межа плинності характеризує напруження, при якому відбувається більш плавний перехід до пластичної деформації.

Після проходження точки S на діаграмі розтягу, в досліджуваному зразку розвивається інтенсивна пластична деформація. До моменту досягнення точки b робоча частина зразка зберігає свою первинну форму. Видовження в цьому випадку рівномірно розподіляється по всій довжині зразка. В точці b діаграми описана макрорівномірність пластичної деформації порушується. В певній частині зразка, що локалізований зазвичай поблизу концентратора напруги, що існував в початковому стані чи утворився в процесі розтягу, відбувається концентрація деформації. Їй відповідає локальне звуження поперечного перерізу зразка – утворення шийки.

II.МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

2.1. Метод молекулярної динаміки для розрахунку механічних властивостей матеріалів

Метод класичної молекулярної динаміки для опису властивостей багатоатомних систем ґрунтується на розв'язку рівнянь руху кожного атома:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i, \quad (2.1)$$

де m_i , r_i , F_i – відповідно, маса, радіус-вектор та сила, що діє на атом з номером i . Діюча на атом сила може бути знайдена завідомою потенціальною енергією взаємодії атомів в системі:

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla} U(\vec{r}). \quad (2.2)$$

Моделювання систем методом молекулярної динаміки включає наступні етапи:

- генерація стартової конфігурації атомів, тобто задавання початкових координат атомів, їхніх мас, зарядів, визначення типу граничних умов;
- генерація початкових швидкостей кожного атома за відомою початковою температурою системи
- запуск динаміки системи, в процесі якого через малий крок по часу виконується чисельний розв'язок рівнянь (2.1). На основі отриманого розв'язку оновлюються положення \mathbf{r} , швидкість \mathbf{v} та прискорення \mathbf{a} кожного атома.
- за відомими \mathbf{r} , \mathbf{v} та \mathbf{a} можуть бути обчислені макроскопічні параметри системи за допомогою процедури статистичного усереднення.

В даній роботі моделювання методом молекулярної динаміки реалізувалось за допомогою програмного пакету LAMMPS [10]. Цей пакет є класичним кодом молекулярної динаміки, що дозволяє розглядати ансамблі частинок в рідкому, твердому або газоподібному стані. За допомогою

LAMMPS можуть моделювати атомні, полімерні, металеві, гранульовані системи з використанням різних силових полів і граничних умов. Для ефективності обчислень LAMMPS використовує списки сусідів для відстеження оточення частинки.

2.2. Потенціали міжатомної взаємодії в системі Al/SiC

Оскільки досліджувані наноккомпозити містять атоми трьох сортів, то важливою проблемою перед стартом моделювання є правильний вибір потенціалу міжатомної взаємодії. В даній роботі для опису міжатомної взаємодії Al-Al тестувався модифікований потенціал зануреного атома (MEAM), який продемонстрував задовільні результати при інших дослідженнях структур на основі алюмінію. Енергія U_{tot} системи в наближенні MEAM-потенціалу записується в наступній формі [11]:

$$U_{tot} = \sum_i \left[F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} S_{ij} \phi_{ij}(R_{ij}) \right], \quad (2.3)$$

де функції F та S визначаються співвідношеннями:

$$F(\bar{\rho}_i) = AE_c \left(\frac{\bar{\rho}_i}{\rho_i} \right), \quad (2.4)$$

$$\bar{\rho}_i = \bar{\rho}_i^{(0)} G(\Gamma), \quad (2.5)$$

$$G(\Gamma) = \frac{2}{1 + e^{-\Gamma}}, \Gamma = \sum_{k=1}^3 t_i^{(k)} \left(\frac{\rho_i^{(k)}}{\rho_i^{(0)}} \right), \quad (2.6)$$

$$\left(\bar{\rho}_i^{(0)} \right)^2 = \left[\sum_{j \neq i} \rho_j^{a(0)} \right]^2, \quad (2.7)$$

$$\left(\bar{\rho}_i^{(1)} \right)^2 = \sum_{\alpha} \left[\sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^{\alpha}}{r_{ij}} \rho_j^{a(1)} \right]^2, \quad (2.8)$$

$$\left(\bar{\rho}_i^{(2)}\right)^2 = \sum_{\alpha,\beta} \left[\sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta}{r_{ij}^2} \rho_j^{a(2)} \right]^2 - \frac{1}{3} \left[\sum_{i \neq j} \rho_j^{a(2)} \right]^2, \quad (2.9)$$

$$\left(\bar{\rho}_i^{(3)}\right)^2 = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \left[\sum_{i \neq j} \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta r_{ij}^\gamma}{r_{ij}^3} \rho_j^{a(3)} \right]^2 - \frac{3}{5} \sum_{\alpha} \left[\sum_{i \neq j} \frac{r_{ij}^\alpha}{r_{ij}} \rho_j^{a(3)} \right]^2, \quad (2.10)$$

$$\rho_i^{a(k)}(r_{ij}) = e^{-\beta_i^{(k)} (r_{ij}/r_e - 1)}, \quad (2.11)$$

$$E''(r) = -E_c (1 + a^* + d(a^*)^3), \quad (2.12)$$

$$a^* = \alpha (r/r_e - 1). \quad (2.13)$$

Для опису взаємодії між атомами Si та C в структурі карбиду кремнію було протестовано два потенціали: Tersoff [12] та Vashishta [13]. Потенціал Tersoff має наступну функціональну форму:

$$U_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} f_c(r_{ij}) \left[A_{ij} e^{-\lambda_{ij} r_{ij}} - b_{ij} B_{ij} e^{-\mu_{ij} r_{ij}} \right], \quad (2.14)$$

де перший та другий доданки в дужках відповідають енергіям відштовхування та притягання, відповідно, а функція f_c відповідає за обривання потенціалу і визначається виразом:

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\pi \frac{(r_{ij} - R_{ij})}{S_{ij} - R_{ij}} \right], & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij}, \\ 0, & r_{ij} > S_{ij} \end{cases}, \quad (2.15)$$

Доданок, що описує притягання в (2.14) модулюється функцією

$$b_{ij} = \chi_{ij} \left(1 + \beta_i^{n_i} \zeta_{ij}^{n_i} \right)^{-1/2n_i} \quad (2.16)$$

Функція ζ_{ij} враховує кутову залежність сили взаємодії:

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{ijk}) \quad (2.17)$$

де

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2} \quad (2.18)$$

Енергія системи в потенціалі Vashishta записується як:

$$U_{tot} = \sum_{i < j} V_{ij}^2(r_{ij}) + \sum_{i, j < k} V_{ijk}^3(r_{ij}, r_{ik}) \quad (2.19)$$

де

$$V_{ij}^2(r_{ij}) = \frac{H_{ij}}{r^{\eta_{ij}}} + \frac{Z_i Z_j}{r} - \frac{\alpha_i Z_j^2 + \alpha_j Z_i^2}{2r^4} e^{-\frac{r}{r_s}} \quad (2.20)$$

$$V_{ijk}^3(r_{ij}, r_{ik}) = R^3(r_{ij}, r_{ik}) P^3(\theta_{ijk}) \quad (2.21)$$

$$R^3(r_{ij}, r_{ik}) = B_{ijk} \exp\left(\frac{l}{r_{ij} - r_0} + \frac{l}{r_{ik} - r_0}\right) \Theta(r_0 - r_{ij}) \Theta(r_0 - r_{ik}) \quad (2.22)$$

$$P^3(\theta_{ijk}) = (\cos \theta_{ijk} - \cos \bar{\theta}_{ijk})^2 \quad (2.23)$$

2.4. Методика розрахунку механічних характеристик нанокомпозитів Al/SiC

Існує три основні підходи, які використовуються для дослідження механічних властивостей композитів. Це статичний (постійна мінімізація напружень), динамічний (молекулярна динаміка при постійному напруженні) та коливальний для розрахунку механічних властивостей з використанням моделювання молекулярної динаміки. В даній роботі було використано статичний метод для оцінки механічних властивостей нанокомпозитів Al/SiC, за допомогою різних силових полів.

У випадку пружної деформації, механічні напруження можна описати за допомогою закону Гука. З урахуванням симетрії тензорів напружень і пружних сталих, кількість незалежних компонентів в тензорі жорсткості зменшується з 81 до 21, отже, закон Гука може бути описаний формулою другого порядку:

$$\sigma_i = C_{ij}\varepsilon_j, \quad (2.24)$$

де $i, j = 1, 2, 3$, σ_i та ε_i – це 6-ти мірні вектори напружень та деформації, а C_{ij} – матриця жорсткості розміром 6×6 .

Розрахунку механічних властивостей передують попередня мінімізація структури, щоб переконатися, що розрахунки базуються на найбільш стійкій конфігурації. Далі мінімізована структура була піддається під набір з 12 деформацій (три пари одновісних напружень стиснення і три пари чистого зсуву), керовані відповідними деформаційними векторами, одна з компонент якого приймає мале значення, а інші фіксуються на нулі. Після цього повторно проводиться мінімізація структури без жодної зміни параметрів комірки. В дослідженнях даної роботи максимальна амплітуда деформації була встановлена на рівні ± 0.003 . Після повторної мінімізації розраховувались компоненти вектора напружень за наступним співвідношенням:

$$\sigma_{ij} = -\frac{1}{V} \sum_k \left(m^k (u_i^k u_j^k) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq k} r_i^{kl} f_j^{kl} \right), \quad (2.25)$$

Тут V – об'єм, m^k та u^k позначають масу та швидкість k -тої частинки, відповідно r^{kl} – відстань між k -ою та l -ою частинками, а f^{kl} – сила що діє на l -ту частинку з боку k -ої частинки. Пружні сталі були отримані як перша похідна $\partial\sigma/\partial\varepsilon$. Коефіцієнти Ламе λ та μ можна розрахувати за наступними рівняннями:

$$\lambda = \frac{1}{3}(C_{12} + C_{23} + C_{13}), \quad (2.26)$$

$$\mu = \frac{1}{3}(C_{44} + C_{55} + C_{66}). \quad (2.27)$$

На їх основі можна розрахувати механічні характеристики матеріалу, що включають об'ємний модуль стиснення B

$$B = \lambda + \frac{2\mu}{3}, \quad (2.28)$$

модуль Юнга E

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu}, \quad (2.29)$$

модуль зсуву G

$$G = \mu, \quad (2.30)$$

та коефіцієнт Пуассона ν

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}. \quad (2.31)$$

Досліджувані нанокompозити створювались за допомогою програмних команд пакету LAMMPS. На першому етапі генерувалась кубічна комірка алюмінію з розмірами $10 \times 10 \times 10$ кристалічних решіток. Далі всередині комірки створювалась сферична порожнина шляхом видалення атомів алюмінію. Нарешті, утворена сферична порожнина заповнювалась атомами Si та C, розміщеними у вузлах решітки карбїду кремнію. Кількість атомів в структурі становила близько 70 тисяч. Типовий приклад досліджуваної композитної структури показано на рис. 2.1.

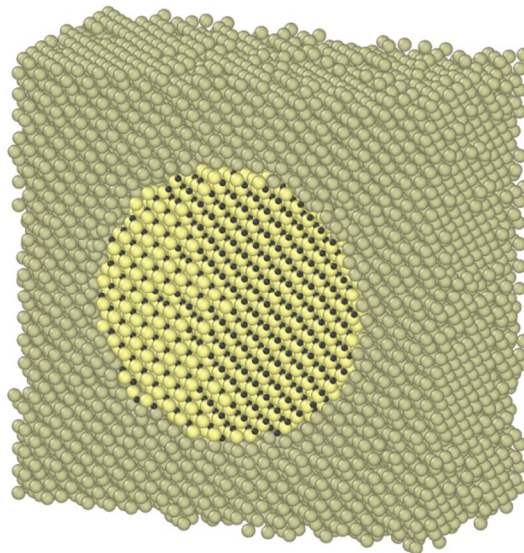


Рис.2.1. Схема модельної структури композиту Al/SiC. В матриці алюмінію розміщується сферичне включення (наночатинка) SiC

Для запуску молекулярної динаміки на всіх гранях досліджуваної структури накладались періодичні граничні умови. Початковий розподіл швидкостей атомів генерувався за допомогою вбудованого в LAMMPS генератора випадкових чисел виходячи з температури зразка. Інтегрування рівнянь руху реалізувалось з використанням алгоритму Верле. Крок інтегрування по часу становив 1 фс. Мінімізація енергії здійснювалась методом спряженого градієнту.

III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1. Тестування потенціалів міжатомної взаємодії для опису механічних властивостей в системі Al/SiC

Результати розрахунку фізичних властивостей матеріалів методом молекулярної динаміки суттєво залежать від вибору оптимального потенціалу для опису міжатомної взаємодії. Оскільки головним завданням даної роботи було дослідження механічних властивостей нанокompозитів Al/SiC, то на першому етапі її виконання необхідно було визначити оптимальний потенціал для моделювання механічної поведінки вказаного матеріалу. Варто зауважити, що компоненти досліджуваного композиту є абсолютно відмінними як за кристалічною структурою, так і з типом хімічних зв'язків. Зокрема, алюміній характеризується металевим типом зв'язку та гранецентрованою кубічною решіткою, тоді як досліджуваний карбід кремнію β -SiC кристалізується з утворенням решітки типу цинкової обманки та володіє ковалентним типом хімічного зв'язку. З огляду на це, неможливо запропонувати універсальний потенціал міжатомної взаємодії, який однаково вдало описуватиме взаємодію в досліджуваній багатокомпонентній системі. Тому в роботі було використано підхід, який передбачає використання декількох потенціалів для опису взаємодій між атомами різних сортів. Для вибору оптимальний потенціалів було проведено тестування окремих потенціалів на предмет коректності опису механічних властивостей компонент досліджуваного композиту. Зокрема, для взаємодії Al-Al тестувався модифікований потенціал зануреного атома (MEAM), для взаємодії Si-C, Si-Si, C-C тестувались потенціали Tersoff та Vashishta, а взаємодію між атомами Al та Si або C описували за допомогою потенціалу Морзе.

Тестування потенціалів MEAM, Tersoff та Vashishta здійснювалось шляхом молекулярно-динамічного моделювання процесу одновісного

розтягу монокристалічного Al та SiC при $T=300\text{K}$ зі сталою швидкістю деформації. В процесі одновісного розтягу кожному значенню деформації ставилось у відповідність значення внутрішніх механічних напружень, які розраховувались за методикою, описаною в розділі II. За отриманими даними було побудовано криві напруження-деформація.

На рис.3.1 показано розраховану з використанням потенціалу MEAM криву напруження-деформація для алюмінію при 300 K. За лінійною ділянкою вказаної кривої було розраховано модуль Юнга E матеріалу як кутовий коефіцієнт нахилу прямої $\sigma(\epsilon)$. Отримане значення $E=63\text{ ГПа}$ добре узгоджується з експериментальним ($E_{експ}=70\text{ ГПа}$). За розрахованими кривими $\sigma(\epsilon)$ в інтервалі температур 300-1000 K було побудовано залежність $E(T)$ (рис.3.2). З наведених даних видно, що модуль Юнга Al монотонно зменшується з ростом температури, що відповідає реальній фізичній поведінці вказаної механічної характеристики. З огляду на описані результати сам потенціал MEAM було обрано для опису взаємодії Al-Al при розрахунку механічних властивостей композитів Al/SiC.

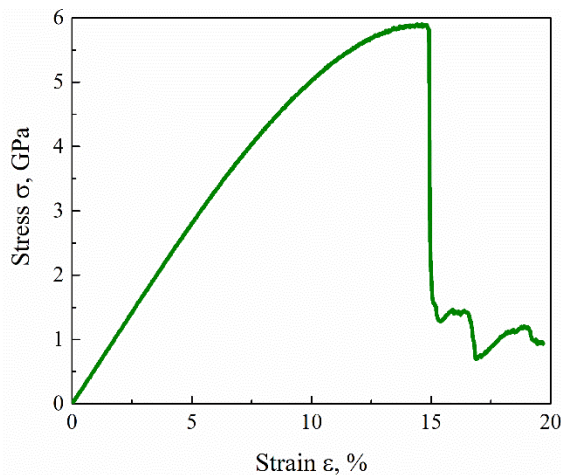


Рис.3.1. Крива напруження-деформація, розрахована з потенціалом MEAM для Al при температурі $T=300\text{ K}$

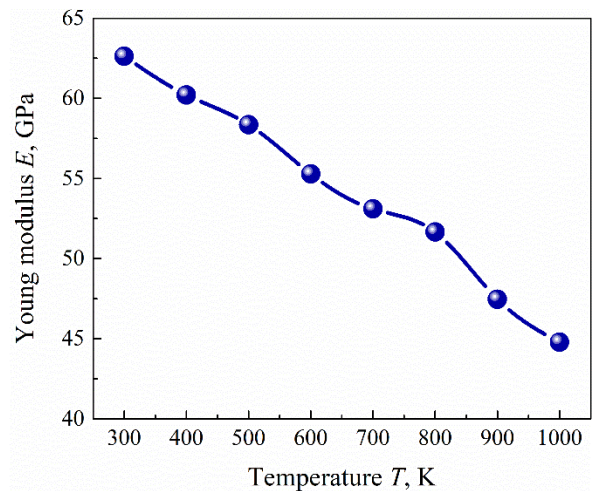


Рис.3.2. Температурна залежність модуля Юнга Al, розрахована за лінійними ділянками кривих напруження-деформація

Для випадку карбиду кремнію тестувались два поширені потенціали – Tersoff та Vashishta. Результати розрахунку кривих напруження-деформація з вказаними потенціалами показано на рис.3.3. Визначені з ділянки, яка відповідає пружній деформації, модулі Юнга дорівнюють $E=307$ ГПа у випадку потенціалу Vashishta та $E=447$ ГПа при використанні потенціалу Tersoff. Останнє значення є ближчим до експериментального, яке згідно літературних даних становить 392-694 ГПа. Однак, подальші розрахунки температурної залежності $E(T)$ (рис.3.4) продемонстрували, що використання потенціалу Tersoff приводить до нефізичної поведінки модуля Юнга, яка проявляється в зростанні E зі збільшенням температури. В той же час, розрахунок з потенціалом Vashishta дає очікувану залежність модуля Юнга від температури, що демонструє монотонне зменшення величини E при зростанні температури. Враховуючи вищевикладене, для опису міжатомних взаємодій Si-Si, Si-C, C-C в нанокompозитах Al/SiC було обрано потенціал Vashishta.

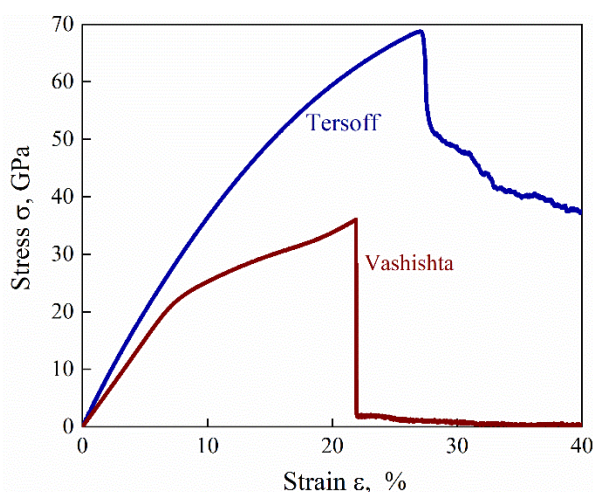


Рис.3.3. Криві напруження-деформація, розраховані з потенціалами Vashishta та Tersoff для SiC при температурі $T=300$ К

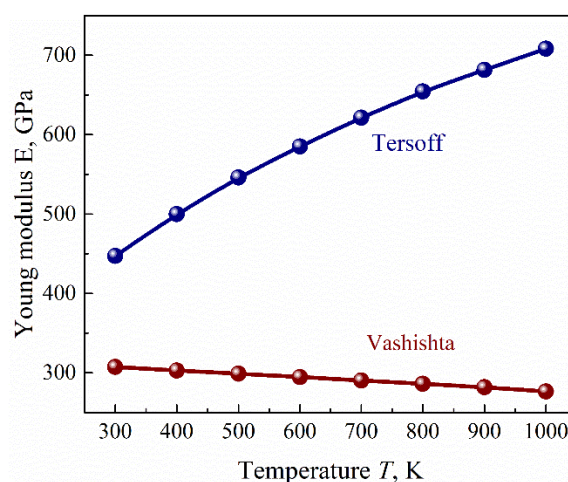


Рис.3.4. Температурні залежності модуля Юнга SiC, розраховані за лінійними ділянками кривих напруження-деформація

3.2. Концентраційні залежності механічних характеристик нанокомпозитів Al/SiC

Наступним етапом досліджень роботи були розрахунки механічних властивостей нанокомпозитів Al/SiC в залежності від об'ємної частки карбиду кремнію в матеріалі. Для варіації вмісту SiC в процесі молекулярно-динамічних розрахунків змінювався радіус сферичного нановключення (рис.2.1) при незмінних розмірах кубічної комірки алюмінію. Результати розрахунків показано на рис.3.5.

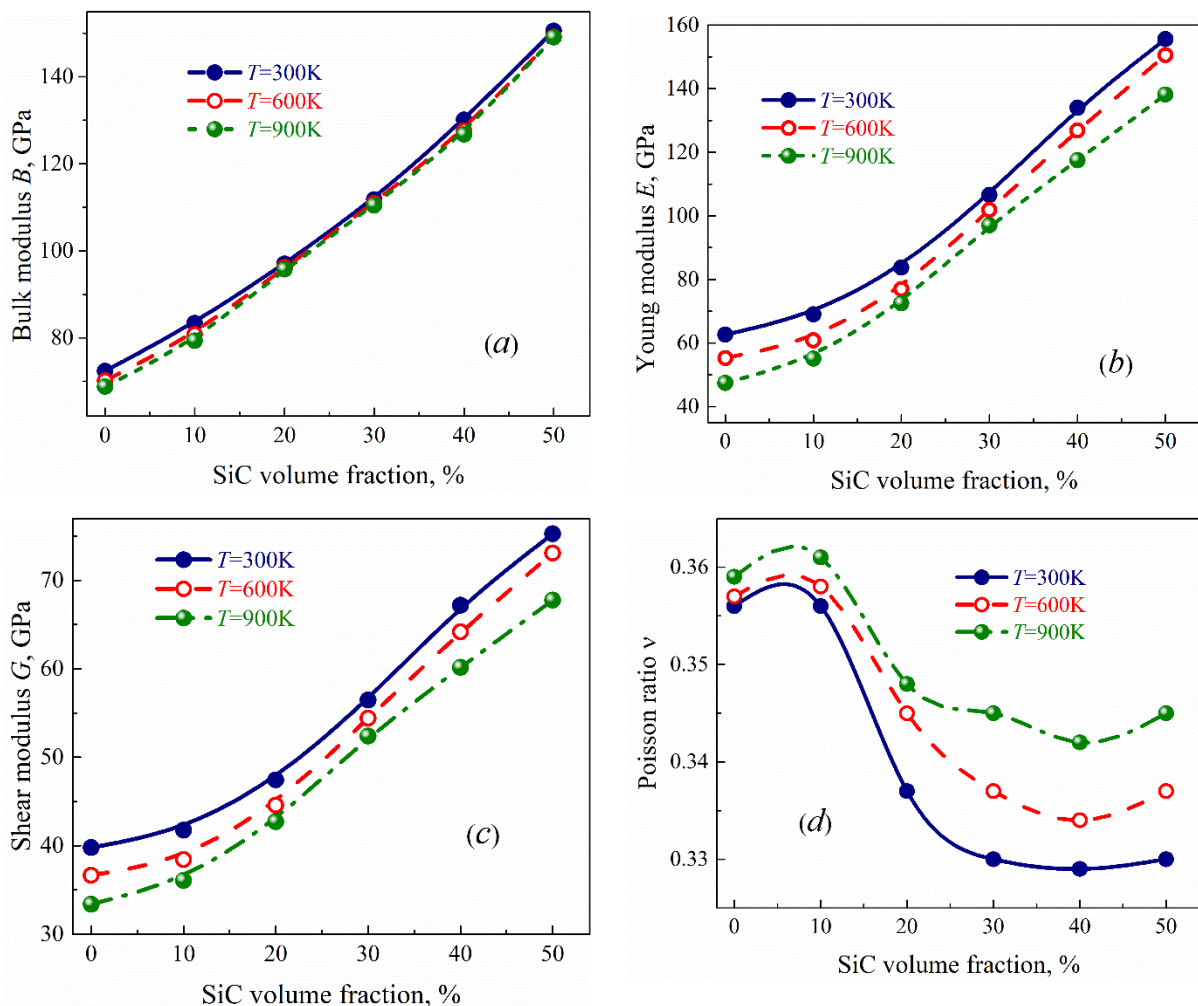


Рис.3.5. Залежності модуля об'ємного стиснення B (a), модуля Юнга E (b), модуля зсуву G (c) і коефіцієнта Пуассона ν (d) від об'ємного вмісту наночастинок карбиду кремнію в композиті Al/SiC при температурах 300 К,

600 К, 900 К

Як видно з представлених даних, модуль об'ємного стиснення B становить приблизно 73 ГПа для чистого алюмінію і монотонно зростає зі збільшенням частки нановключень карбїду кремнію в композиті (рис.3.5, *a*). При вмісті SiC на рівні 50% значення модуля B становить близько 150 ГПа. Помітно, що залежність B від частки SiC при температурах 300 К, 600 К та 900 К майже не відрізняється, що свідчить про слабку залежність модуля об'ємного стиснення композиту від температури.

Концентраційна залежність модуля Юнга E (рис.3.5, *b*) виявляє монотонне збільшення величини E від 63 ГПа для монокристалічного Al до 157 ГПа для композиту з 50% вмістом наночастинок SiC. При цьому проявляється зміна модуля Юнга з температурою. Аналогічною є і поведінка модуля зсуву (рис.3.5, *c*).

Коефіцієнт Пуассона досліджуваних композитів (рис.3.5, *d*) при температурі 300 К змінюється в вузьких межах від 0.36 до 0.33 для нанокompозиту з 50% наночастинок SiC. При збільшенні температури вказаний інтервал зміни коефіцієнта Пуассона стає ще вужчим.

Виявлені концентраційні зміни механічних характеристик нанокompозиту Al/SiC пов'язані зі збільшенням частки матеріалу з вищими пружними модулями. Як наслідок, збільшення концентрації карбїду кремнію зумовлюватиме підвищення пружних модулів композиту.

3.3. Температурні залежності механічних характеристик нанокompозитів Al/SiC

В роботі також вивчались температурні залежності пружних коефіцієнтів нанокompозитів Al/SiC. Відповідні результати показано на рис.3.6.

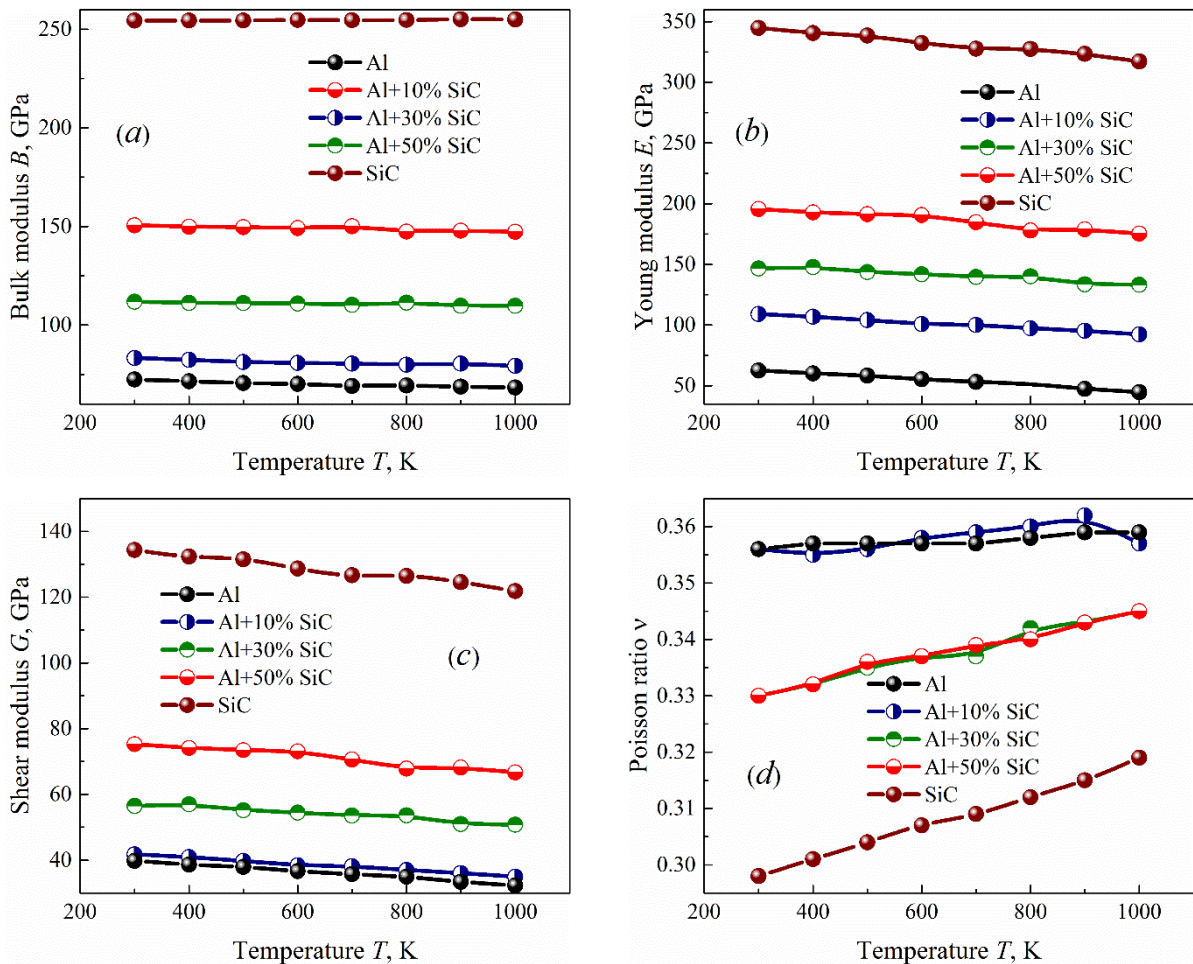


Рис.3.6. Залежності модуля об'ємного стиснення B (a), модуля Юнга E (b), модуля зсуву G (c) і коефіцієнта Пуассона ν (d) від температури композиту Al/SiC при об'ємного вмісті наночастинок карбїду кремнію 10%, 30%, 50 %, а також для монокристалічних Al та SiC

Як видно з представлених залежностей, модуль об'ємного стиснення слабо змінюється з температурою як для монокристалічних Al та SiC, так і для нанокомпозитів Al/SiC з різним відсотковим вмістом наночастинок карбїду кремнію (рис.3.6, a).

Модуль Юнга E для монокристалічного алюмінію повільно зменшується з температурою від 63 ГПа при 300К до 45 ГПа при 1000 К (рис.3.6, b). При додаванні в алюмінієву матрицю наночастинок карбїду кремнію крива $E(T)$ зміщується в бік вищих значень модуля Юнга. Зі збільшенням вмісту

наночастинок SiC відбувається наближення кривої $E(T)$ до аналогічної залежності чистого карбиду кремнію.

Залежність модуля зсуву $G(T)$ є схожою на температурну поведінку модуля Юнга (рис.3.6, *c*). Але збільшення G при додаванні 10% наночастинок карбиду кремнію є менш вираженим, ніж у випадку залежності $E(T)$.

Коефіцієнт Пуассона нанокompозиту Al/SiC має тенденцію до зростання при збільшенні температури (рис.3.6, *d*). При цьому помітні зміни коефіцієнта Пуассона проявляються при концентраціях SiC вище 10%.

Зменшення пружних модулів нанокompозитів Al/SiC з температурою пов'язана зі збільшенням міжатомної відстані при нагріванні матеріалу. Останній процес зумовлює ослаблення міжатомних зв'язків з відповідним пом'якшенням матеріалу. Додатковим фактором в нанокompозитах є наявність гетеромежі Al-SiC, де наявні обірвані зв'язки, кількість яких зростає при нагріванні структури.

IV.ВИСНОВКИ

1. Методом молекулярної динаміки змодельовано одновісний розтяг монокристалічного Al з використанням потенціалу MEAM та монокристалічного SiC з потенціалами Vashishta і Tersoff. Виявлено, що міжатомна взаємодія алюмінії задовільно описується потенціалом MEAM, а міжатомні взаємодії в структурі карбїду кремнію можна описати з використанням потенціалу Vashishta, тоді як потенціал Tersoff приводить до нефізичної температурної залежності модуля Юнга.
2. Розраховано концентраційні залежності механічних характеристик нанокompозитів Al/SiC. Виявлено збільшення модулів Юнга, зсуву та об'ємного стиснення зі зростанням вмісту наночастинок SiC від 0 до 50%.
3. Розраховано температурні залежності механічних характеристик нанокompозитів Al/SiC в інтервалі температур 300-1000 К. Встановлено, що модуль Юнга та модуль зсуву нанокompозитів монотонно зменшуються, коефіцієнт Пуассона зростає, а модуль об'ємного стиснення практично не змінюється при збільшенні температури в досліджуваному інтервалі.

V. СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Гуляев А.П. *Металловедение*. М.: *Металлургия* / Гуляев А.П. (Учебник для вузов в 6-и изданиях) 1986г. — 272 с.
- [2] Recent progress in synthesis, properties and potential applications of SiC nanomaterials. *Progress in Materials Science* / [Renbing Wu, Kun Zhou, Chee Yoon Yuen, Jun Wei, Yi Pan], 2015. — [2] 1–60 p.
- [3] Molecular Dynamics Study on Mechanical Properties and Interfacial Morphology of an Aluminum Matrix Nanocomposite Reinforced by Silicon Carbide Nanoparticles. [H. Gu, X.-L. Gao, and X. C. Li] (*Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*) 2009. — Vol.6, 61–72 p.
- [4] Adnan I.Khdaira Enhanced strength and ductility of Al-SiC nanocomposites synthesized by accumulative roll bonding / A.Fathy. — (*Journal of mater. Res. Technol.*) 2020. — 9(1): 478–489 p.
- [5] Effect of SiC content on dry sliding wear, corrosion and corrosive wear of Al/SiC nanocomposites / [Sareh Mosleh-Shirazi, Farshad Akhlaghi, Dong-Yang Li] (*Trans. Nonferrous Met. Soc.*) 2016. — China:1801–1808 p.
- [6] Micromechanical study of elastic-plastic and thermoelastic behaviors of SiC nanoparticle-reinforced aluminum nanocomposites / [M.K. Hassanzadeh-Aghdam, M. Haghgoo, R. Ansari] (*Mechanics of Materials*) 2018. — 121, 1-9 p.
- [7] Galusek Mechanical properties and sliding wear behaviour of Al₂O₃-SiC nanocomposites with 3–20 vol% SiC. / [M. Parchovianský, J. Balkob, P. Švančáreka, J. Sedláček, J. Duszab, F. Lofajb, D.] (*Journal of the European Ceramic Society* 37) 2017. — 4297-4306 p.
- [8] Yanguang Zhou Mechanical behaviors of nanocrystalline Cu/SiC composites: An atomistic investigation / Ming Hu — [*Computational Materials Science* 129] 2017. — 129-136 p.

[9] Епифанов Г.И. Физика твердого тела — Москва, издательство «Высшая школа», 1978. — 107–113 с.

[10] S. Plimpton Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics / J. Comput. Phys, 1995. – V. 117.– 1–19 p.

[11] B.-J. Lee Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for bcc transition metals / M. Baskes, H. Kim, and Y. Koo Cho Phys. (Rev. B 64) 2001. —184 p.

[12] J. Tersoff Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems, 1989. — (Phys. Rev. B 39) . —5566–5568 p.

[13] P. Vashishta Interaction potential for silicon carbide: A molecular dynamics study of elastic constants and vibrational density of states for crystalline and amorphous silicon carbide / R. K. Kalia, A. Nakano, and J.P. Rino (J. Appl. Phys.), 2007. — 101, 1035 p.