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

На правах рукопису

Молекулярно-динамічне моделювання процесу поширення тріщини в дибориді титану

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

Кваліфікаційна робота бакалавра
Студента4 року навчання
Вадима ШВЕРНИКА

Науковий керівник:
Кандидатфізико-математичних наук,
доцент, завідувач кафедри фізикиметалів
Василь КУРИЛЮК

Робота заслухана на засіданні кафедри фізики металів та рекомендована до захисту на ЕК, протокол №11 від «15» червня 2023 р.

Завідувач кафедри фізики металів Василь КУРИЛЮК

Київ – 2023

ВИТЯГ

з протоколу №_____

засідання Екзаменаційної комісії

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

Голова ЕК _____

«____» _____ 2023 р.

АНОТАЦІЯ

Вадим ШВЕРНИК.Молекулярно-динамічне моделювання процесу поширення тріщини в дибориді титану.

Кваліфікаційна робота бакалавра за спеціальністю 104 Фізика та астрономія, освітня програма «Фізика». – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, кафедра фізики металів. – Київ – 2023.

Науковий керівник: кандидат фізико-математичних наук, доцент Василь КУРИЛЮК,завідувач кафедри фізики металів.

Методом молекулярної динаміки змодельовано рух тріщини в монокристалічному та полікристалічних зразках дибориду титану. Отримано значення модуля Юнга матеріалу та виконано порівняння з експериментальними даними. Проаналізовано криві навантаження зразків дибориду титану та механізми руху тріщини в них.

Ключові слова: диборид титану, тріщина, механічні властивості, молекулярна динаміка.

SUMMARY

Vadym SHVERNYK. Molecular dynamics simulation of crack propagation in titanium diboride.

Bachelorqualificationworkonthespecialty 104 PhysicsandAstronomy, educationalprogram «Physics». – TarasShevchenkoNationalUniversityofKyiv, FacultyofPhysics, MetalPhysicsDepartment. – Kyiv. – 2023.

Researchsupervisor: CandidateofPhysical and MathematicalSciences, Docent Vasyl KURYLIUK, Head of the Department of Metal Physics.

The crack propagation in monocrystalline and polycrystalline samples of titanium diboride was modeled using the molecular dynamics method. The values of the material's Young's modulus were obtained and compared with experimental data. The stress-strain curves of titanium diboride samples and the crack propagation mechanisms within them were analyzed.

Keywords: Titanium diboride, Crack, Mechsnical properties,Molecular dynamics.

ЗМІСТ

ВСТУП 3

І.ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД 4

1.1 Загальні властивості дибориду титапу 4

1.2 Огляд експериментальних досліджень дибориду титану 6

1.3 Огляд результатів моделювання дибориду титану 9

ІІ. МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ 14

ІІІ.РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ 17

3.1 Моделювання одновісного розтягу структур TiB_2 17

3.2 Моделювання росту тріщини в структурах TiB_2 19

ВИСНОВКИ 24

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ 25

ВСТУП

Диборид титану (TiB_2) є одним з важливих керамічних матеріалів, який знаходить широке застосування у високотехнологічних галузях, включаючи аерокосмічну, автомобільну та енергетичну промисловість. У зв'язку з його властивостями, такими як висока твердість, висока плавність та відмінна стійкість до корозії, диборид титану використовується для виготовлення захисних покриттів, складних структур та компонентів.

Однак, як у багатьох керамічних матеріалах, в дибориді титану під впливом зовнішніх навантажень або внаслідок внутрішніх неоднорідностей можуть виникати тріщини. Розуміння процесу поширення тріщини та механізмів, які впливають на його розвиток, має велике значення для прогнозування міцності та довговічності матеріалу.

У цій роботі було проведено моделювання процесу поширення тріщини в дибориді титану з використанням методу молекулярної динаміки. Робота включала модельювання руху тріщини в монокристалічних та полікристалічних зразках дибориду титану із наступним аналізом отриманих результатів.

Метою дослідження було отримання значень механічних параметрів матеріалу, аналіз кривих навантаження зразків дибориду титану та вивчення механізмів руху тріщини в ньому. Отримані результати дозволяють отримати важливі висновки про механізми поширення тріщини в дибориді титану та їх вплив на механічні властивості. Застосування методу молекулярної динаміки дозволяє детально дослідити атомарну структуру та динаміку тріщини, що є важливим для розуміння фізичних процесів, що відбуваються під час поширення тріщини.

І.ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Загальні властивості дибориду титану

Диборид титану відомий своєю високою міцністю та довговічністю. Головними технічними характеристиками цього матеріалу є висока температура плавлення, зносостійкість та опір.Матеріал має чудовий потенціал для використання в ударостійкій броні, ріжучих інструментах та установках і для використання як зносостійке покриття-напилення. Монокристал титандибориду має гексагональну симетрію. Основні властивості матеріалу представлені в таблиці 1.1.

Таблиця.1.1. Основні механічні характеристики дибориду титану:

Властивість	**Значення**
Щільність	4.52
Точка плавлення	2970
Модуль міцності	410 - 448
Твердість(по Кнупу)	1800
Модуль пружності	510 - 575
Коефіцієнт Пуассона	0.1 - 0.15
Питтомий об’ємний опір	$15x10^{-6}$
Теплопровідність	25

Даний матеріал має високімеханічні характеристики, зокрема:

Модуль пружності. Для ізотропних полікристалічних матеріалів пружні властивості можуть бути вираженими в модулі пружності. Коефіцієнт Пуассона і об’ємний модуль можна розрахувати наступним співвідношенням:

$$\vartheta = \frac{E}{2G} - 1$$

$$B = \frac{E \cdot G}{3(3G - E)}$$

При ν = 0,11 ± 0,08, модульB = (240 ± 57)ГПа дляTiB_2 при кімнатній температурі.

Міцність.Загалом міцність крихкого матеріалу на розриві обмежена мікроструктурами і є недоліком матеріалу, бо дані крихкі зразки мають розподіл розміру дефектів, які призводять до розподілу обчислених значень міцності. Диборид титанупоказує більші значення міцності при стисканні ніж при згині або розтягуванні.

Ударна в'язкість. Чіткішого розуміння про роль розміру зерна титан дибориду задля оптимізації механічних властивостей ми досягаємо враховуючи його ударну в'язкість виміряну за допомогою показника Ів індексі KIc. Для зразку при кімнатній температурі з масовою TiB_2≥ 98%, KIc має максимальне значення для середнього розміру зерна в межах 5μм ≤ g ≤ 12μм.

Тертя і зносостійкість матеріалу. Диборид титану дуже часто використовується, як зносостійкий матеріал. При оцінці потенційних характеристик матеріалу при трибологічному застосуванні також важливо брати до уваги тертя та послідовність зношення при ковзанні одного зразка матеріалу по іншому зразку того ж матеріал при відсутності мастильних речовин. Поведінка титан дибориду в умовах зносу ускладнюється в тому числі взаємодією зразку з киснем в атмосфері.

Питома теплоємність. Є декілька важливих теплових властивостей, які підходять для використання матеріалів при високих температурах. Перша з них – питома теплоємність, тобто кількість енергії, яка поглинається на одиницю маси для збільшення температури на 1К. Для зразків з відносно високою чистотою та щільністю ця величина досить нечутлива до коливань розміру зерна або наявністю невеликої кількості домішок.

1.2 Огляд експериментальних досліджень дибориду титану

За останні 5 років суттєво виріс інтерес в дослідження Тіта TiB_2. Застосування композитів Ті варіюється від автомобільної та аерокосмічної галузі до спортивних і навіть біомедичних товарів.Відомо, що Ті за своєю суттю страждає від високої зносостійкості і відносно низької жорсткості, тому включення у сполуку мікрочастинок та вусів було успішним рішенням для усунення таких недоліків. Одним з найбільш успішних композитів титану є монокристал TiBw. Цей легкий композит забезпечує переваги, які включають підвищену жорсткість, твердість, міцність і зносостійкість порівняно з неармованим Ті.Поштовхом до досліджень також стало опублікування нових сучасних підходів до обробки матеріалу: лазерне плавлення, гібридні композити на основі Ті, кування, екструзія, гаряча прокатка, іскрове плазмове спікання. Також одним із фундаментальних методів утворення композитів титан–борид є використання процесу порошкової металургії, оскільки цей тип обробки надає переваги обробки чистої форми та мінімізує кількість відходів матеріалу.

У роботі [1] порівняли дослідження титану і дибориду титану отриманого за рахунок іскрового плазмового спікання (Sparkplasmasintering – надалі скорочення SPS) проти гарячого ізостатичного пресування (Hot isostatic pressing –HIP) вакуумного спікання.Під час SPSобробки продукти виготовлені з дибориду титану переважно перетворювались на металічні вуса TiBw. Це доволі очікувано, оскільки електричний струм має внутрішній ефект, який збільшує дифузію та кінетику фазового перетворення.З іншого боку, морфологія TiB_2 у зразках Ті–TiB вироблених HIP була сферичною, а також тонкі вуса були знайдені в матеріалів, спечених у вакуумі. Ці різні мікроструктури призвели до зміни механічних характеристик. Наприклад, іскрове плазмове спіканняматеріалу здебільшого демонструвало покращені механічні властивості матеріалу у порівнянні з продуктами гарячого ізостатичного пресування або вакуумного спікання. При порівнянні способів

стало зрозуміло, щозбільшення вмісту TiBw призводить до збільшення модуля пружності, твердості,контактної жорсткості і опору повзучості при зменшеннів'язкості руйнування, а збільшення вмісту залишкового титану зазвичай призводить до кращої в'язкості руйнування. Залишковий диборид титану продовжував зберігатись в композитах після SPSпри температурі до 1000С і був межею між TiBw і Ti, на які вплинула початкова температура спікання.Також вражаючих технічних характеристик можна досягнути у ливарному сплаві WC і TiB2, що описувалось в роботі[2] автор стверджує, що межа міцності на розрив досягає 406 МПа, межа плинності 253 МПа, а подовження при розриві склало 7,4 %.

Окрім SPS та HIP досліджень титану та його композитів під впливом температури, також проводяться дослідження наноіндентування плівок TiB_2нанесених на Si, які описуються в роботі[3].В цій роботі було помічено, що на модуль плівки впливали підкладки від 30 нм і більше. Аналіз енергії матеріалу показав, що зі збільшенням навантаження - енергії, яка поглинається субстратом стає більше.В роботі [4] для виготовлення SiC–TiB_2 був описаний зручний і перспективний одноетапний процес виробництвапористої кераміки. Сполуки сахарози, TiO_2, B_4C використовувалися як сировина для генерації фази TiB_2, яка сприяла досягненню сильного взаємозв'язку ефекту пористості від досліджуваних об'ємних часток TiB_2 в пористих структурах, отриманню високих показників параметрів пор та механічних властивостей. Отримана пориста кераміка SiC–TiB_2 з пористістю від 36,2% до 41,9%, розміром пор від 2 мкм до 10 мкм і високою міцністю на стиск до 169,5 МПа. Окрім загальної пористості та вмісту TiB_2 у кераміці були описані важливі фактори, які впливають на механічні характеристики матеріалу при утворенні пористої кераміки, тому на основі співвідношення міцність-пористість було описане розширене рівняння для моделювання та оптимізації механічних властивостей двофазної пористої кераміки.

Для покращення механічних характеристик TiB_2 можна використовувати нееквіатомні високоентропійні сплави.У роботі[5] використовувалась сполука CoCrFeNiMo. Композити з 6% та 10% вмістом TiB_2 були виготовленні шляхом механічного легування та SPS. Фазовий аналіз виявив наявність у композитах ГЦК-фази TiB_2.Дослідження мікроструктури за допомогою скануючої електронної мікроскопії, трансмісійної електронної мікроскопії дозволили отримати розуміння впливу межі карбіду на в’язкість руйнування та міцність композитів TiB_2.Трансмісійний електронний мікроскоп виявив проміжний шар товщиною в кілька нанометрів між фазами TiB_2, що сприяє підвищенню змочуваності між керамікою та сполучною фазою. На режим руйнування вплинула концентрація зв’язуючого CoCrFeNiMo, тобто домінуючий спосіб руйнування змінився з міжзеренного на трансгранулярний, коли вміст зв'язуючого збільшився з 6 до 10%.Відносна щільність, твердість за Віккерсом і в'язкість руйнування композиту з 10% вмістом TiB_2 досягало 98,50 ± 0,30%, 22,00 ± 0,62 ГПа та 9,23 ± 0,45 МПа, відповідно.Висока в'язкість до руйнування композиту TiB_2була результатом поєднаннявисокої щільності, відмінної змочуваності, перекриттям тріщин і транскристалічним руйнуванням частинок TiB_2.

Контроль мікроструктури та компаундування на стадії синтезу речовин TiB_2–SiC можуть покращити характеристики композиту. У роботі[6] досліджувався вплив співвідношення матеріалу та температури синтезу на синтезовані порошкита оцінено властивості мікрохвильового поглинання синтезованих порошків TiB_2–SiC. Встановлено, що TiB_2–SiC продемонстрував відмінні властивості мікрохвильової адсорбції з досягнутими мінімальними втратами на відбиття − 21,8 дБ на 17,4 ГГц, що відповідає товщині 4 мм. Висока продуктивність виникла черезміжфазну поляризацію між межами розділу TiB_2–SiC.

1.3 Огляд результатів моделювання дибориду титану

Моделювання процесу поширення тріщин в твердортільних матеріалах є важливим етапом для створення функціональних тріщиностійких матеріалів. Зокрема, в статті [7] досліджували вплив водню на механізм формування вершини тріщини в монокристалі Al. Модель тріщин зі змінною концентрацією водню було досліджено на основі теорії молекулярної динаміки (МД). Подію зародження вершини тріщини було проаналізовано з використанням розв'язку для змішаних режимів переміщення для полів вершини тріщини за режимом I та режимом II. Було оцінено критичний коефіцієнт інтенсивності напружень для початку деформації вершини тріщини. Детальний опис на основі аналізу деформації атомного зсуву фон Мізеса показав, що присутність водню поблизу вершини тріщини суттєво пригнічує активність емітованих часткових дислокацій. Виявлено, що блокування воднем дислокацій поблизу вершини тріщини сприяє локальній аморфізації вершини тріщини, що суттєво знижує критичний коефіцієнт інтенсивності напружень для початку росту тріщини. Далі проаналізовано вплив режиму навантаження на атомно-масштабний механізм водневого окрихчення (ВО) і виявлено чітку залежність від площинного зсувного навантаження.

За допомогою моделювання молекулярної динаміки в статті [8]було досліджено вплив аморфних міжкристалічних плівок (АМД) та їхньої товщини на можливе сповільнення тріщиноутворення в нанокристалічному міді за умов розтягування та циклічного навантаження. Структурний аналіз проводили на основі різних методів, таких як параметр центросиметрії, аналіз спільного сусіда та атомна деформація. Результати показали, що зразки з товщиною АІФ всього 0,5 нм можуть обмежувати поширення як перпендикулярних, так і паралельних тріщин при одновісній деформації розтягу. Зі збільшенням товщини АІФ розповсюдження тріщин ще більше сповільнюється через затуплення вершин тріщин. Атомно-деформаційний

аналіз також показав, що товстіший АІФ сильніше локалізує розподіл деформацій, таким чином гальмуючи зародження множинних міжкристалічних тріщин і подальше швидке руйнування. У разі циклічного навантаження деформація накопичувалася через утворення двійників/накопичення дефектів при товщині АІФ 0,5 і 1 нм, які можуть взаємодіяти з АІФ і, зрештою, спричинити зародження пустот/тріщин. Однак збільшення товщини АІФ до 2 нм може обмежити цей механізм, оскільки деформація в основному сприймається аморфною фазою.

В статті [9] було описано, що на властивості руйнування матеріалу суттєво впливає наявність дефектів. З огляду на це, в рамках методу вбудованих атомів було проведено молекулярно-динамічне моделювання для дослідження поведінки вершини тріщини при навантаженні I режиму в ГЦК Al з дефектами та без них. Дефекти, що складаються з випадкового розподілу вакансій, були введені в попередньо розтріскану матрицю. Результати показують значну зміну поведінки при руйнуванні Al з дефектами. Виявлено, що взаємодія між вершиною тріщини і вакансіями змінює концентрацію напружень у вершині тріщини. Збільшення вмісту вакансій призводить до збільшення затуплення вершини тріщини і зменшення швидкості поширення тріщини порівняно з безвакансійним матеріалом, тим самим підвищуючи в'язкість матеріалу до руйнування. Підкреслено важливість таких досліджень для отримання глибшого розуміння поведінки руйнування на більш високих масштабах.

З роботи [10]зрозуміло, що межі зерен є одним з основних мікроструктурних бар'єрів на шляху росту коротких тріщин у більшості металевих матеріалів. У цій роботі за допомогою методу молекулярної динаміки досліджено вплив заданого кута закручування і кута нахилу границі зерен (ГЗ) на поширення і швидкість росту тріщини в бікристалічному алюмінії. Результати показують, що опір ГЗ з великим кутом повороту поширенню тріщини набагато більший, ніж у ГЗ з нахилом, завдяки поширенню в області ГЗ і зміні напрямку тріщини. Дислокації можуть

переміщуватися завдяки розподілу напружень у передній частині тріщини, що призводить до міграції малокутових границь зерен, незалежно від кута скручування або кута нахилу. Результати також вказують на те, що існує сильний зв'язок між напруженням і стадією поширення тріщини. Загалом, швидкість поширення і росту тріщини є більш чутливою до кута закручування ГЗ.

З метою виявлення поведінки мікротріщин монокристалічного титану в умовах нанорозмірних напружень зсуву в статті [11] було побудовано модель молекулярної динаміки монокристалічного титану. Сила зсуву прикладена до моделі монокристалічного титану з орієнтацією кристалів (0001)[1210] та (1010)[1210], відповідно. Кристалічну структуру проаналізовано методом аналізу спільних сусідів (CNA) та алгоритмом екстракції дислокацій (DXA) для виявлення дефектів і дислокацій, які розкривають механізм еволюції мікроструктури монокристалічного титану. Результати показують, що під дією напруги зсуву дислокація монокристалічного титану в основному формується в області тріщини і дислокація повністю переміщується вздовж напрямку сили зсуву.Коли сила зсуву прикладена до орієнтації кристала (0001) [1210], утворення дислокацій супроводжується великомасштабною фазовою зміною, а режим розповсюдження дислокацій є одноточковим джерелом Франка-Ріда. При дії зсувної сили на кристал з орієнтацією (1010)[1210] дислокація кристала спочатку генерується в області тріщини, а режим поширення дислокації є динамічним механізмом проліферації. Потім дислокація виникає в куті матеріалу і в атомному шарі відбувається безперервне ковзання, що серйозно впливає на опір зсуву монокристала α-Ti.

У роботі[12]за допомогою молекулярної динаміки досліджено вплив вмісту азоту на поведінку поширення тріщин у нанокристалічному сплаві залізо-азот (Fe-N) за високих температур. Для моделювання міжатомних взаємодій було використано напівемпіричну функцію потенціалу модифікованого методу вбудованих атомів (MEAM). Результати показали, що при вищих температурах 900 K і 1100 K активується більше систем

ковзання, що призводить до затуплення вершини тріщини перед зародженням і ростом пустот. Крім того, результати показали, що механізм деформації і поведінка руйнування значно змінюються залежно від початкової концентрації азоту. Результати моделювання показали повільне поширення тріщини за низького вмісту азоту (0,1 мас. %). Детальний аналіз підтвердив, що концентрація азоту має значний вплив на поширення тріщини. При високому вмісті азоту (0,51 мас. %) ріст тріщини збільшився за рахунок зміни шляху поширення тріщини.

Зростання і поширення тріщин у попередньо загартованому сплаві NiAl, підготовленому за різних швидкостей гартування в умовах навантаження за режиму I у роботі [13] досліджували за допомогою моделювання молекулярної динаміки на основі потенціалу методу багатьох тіл із вбудованими атомами (EAM). Вплив швидкості гартування оцінювали з точки зору атомних траєкторій, аналізу спільних сусідів (CNA), функції розподілу радикалів (RDF) і склування. Результати моделювання чітко показують, що при збільшенні швидкості гартування в десять разів з 0,5 К/с до 50 К/с об'єм після гартування збільшується приблизно на 1%. Аморфна структура і кристалічна структура демонструють два різних типи поведінки при руйнуванні в діапазоні швидкостей гартування від 0,25 до 50 К/с. В аморфному стані критична напруга зростає зі зменшенням швидкості гартування. Крім того, дві смуги зсуву і зони трансформації зсуву (ЗТЗ) простягаються вздовж напрямку близько 45 по відношенню до горизонтального напрямку від вершини тріщини.

У статті [14]проводили молекулярно-динамічне моделювання з метою вивчення механізмів поширення тріщин у нанорозмірному полікристалічному нікелі на основі швидкостей деформації 2×10^8 c^{-1} і 2 × 1010 c^{-1}. Швидкість деформації має важливий вплив на механізм поширення тріщин у нанорозмірному полікристалічному нікелі. У випадку більшої швидкості деформації індукуються локальні нетривимірні кристалічні атоми і утворюються замки Ломера-Коттрелла, що відіграє критичну роль в

ініціюванні та поширенні тріщин. Різниця в орієнтації між сусідніми зернами призводить до ковзання дислокацій у різних напрямках, що призводить до зародження пустоти поблизу потрійного з'єднання границь зерен і в подальшому сприяє прискоренню розповсюдження тріщини.

ІІ.МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

Моделювання механічних властивостей та руху тріщини в дибориді титану виконувалося методом молекулярної динаміки з використанням відкритого програмного коду LAMMPS. В роботі досліджувалися структури монокристалічного та полікристалічного TiB_2. Відповідні атомні конфігурації модельованих систем показані на рис.2.1.Загальна кількість атомів в структурах для вивчення поширення тріщини складала близько 250 тисяч.

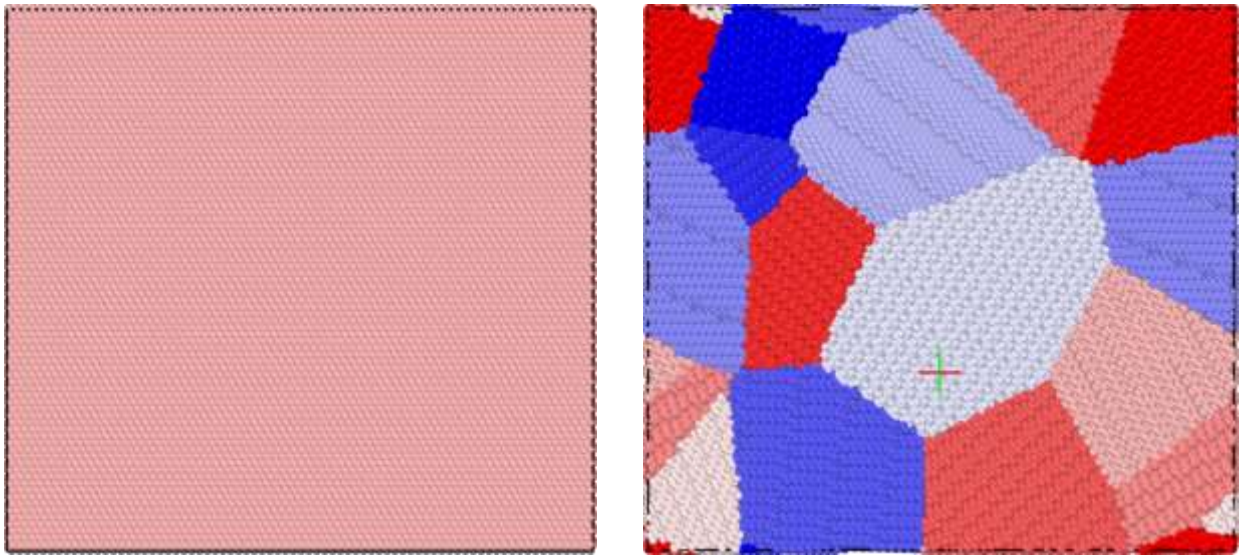

Рис.2.1. Атомні конфігурації монокристалічного (зліва) та полікристалічного зразків TiB_2, що використовувалися при моделюванні

Для опису міжатомної взаємодії в системиTi-Вбуло задіяно потенціал типу MEAM, запропонований Баскесом та ін..Повна енергія *E* системи атомів у MEAM визначається яксума атомних енергій:

$$E = \sum_i E_i$$

Енергія атома складається з енергії вкладання та пари потенціальних доданків:

$$E_i = \sum_i \left[F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) \right]$$

де F_i - функція енергії занурення для атома i в фонову електронну густину $\bar{\rho}_i$, а $\phi_{ij}(r_{ij})$ - парна потенціальна взаємодія між атомами i та j, розділеними відстанню r_{ij}.

Енергія занурення $F_i(\bar{\rho}_i)$ являє собою кількість енергії для вбудовуванняатома i в місце, де фонова електронна густина $\bar{\rho}_i$. Енергія зануренняподається у вигляді:

$$F_i(\bar{\rho}_i) = A_i E_i^0 \bar{\rho}_i \ln(\bar{\rho}_i),$$

де енергія сублімації E_i^0 і параметр A_i залежать віделементарного типу атома.

Для атомістичного моделювання процесу поширення тріщинина першому етапі створювався зародок тріщини шляхом видалення невеликої кількості атомів посередині лівого краю зразка (рис. 2.2).

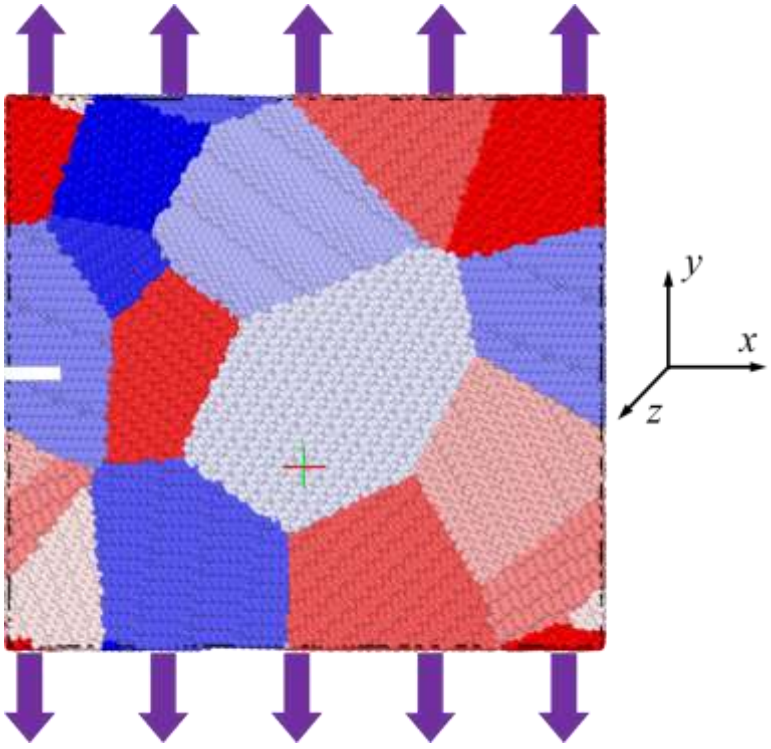

Рис.2.2. Схема моделювання процесу поширення тріщини в зразку полікристалічного TiB_2.

Для отримання стабільного росту тріщини, вздовж осі y (рис.2.2)виконувався розтяг матеріалу з постійною швидкістю. При цьому вздовж осей yта zнакладалися періодичні граничні умови, тоді як розміри

вздовж осі *x* вибиралися достатньо великими, а граничні умови були неперіодичними.

Спочатку модельована система витримуваласяв умовах NVE-ансамблю та протягом короткого часу на стадії рівноваги, в якій відсутні сили, що переривають енергію системи.Далі система переводилася в NVT-ансамбль для релаксації залишкових напружень і деформацій.

Після релаксації структури моделювався розтяг матеріалу вздовж осі *y* з одночасним визначенням внутрішніх напружень і деформації структури. під час поширення тріщини настадії виробництва. Швидкість розтягу в даній роботі становила 0.5Å/пс.

Отримані значення напружень і деформацій записувалися в окремі текстові файли, на основі яких далі будувалися криві напруження-деформація. Крім цього, з певним кроком по часу записувалися також атомні конфігурації системи, візуалізація яких проводилася в програмному пакеті OVITO. За цими даними аналізувався процес поширення тріщини в структурах.

ІІІ.РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1 Моделювання одновісного розтягу структур TiB_2

В першій частині роботи виконувалася апробація потенціалу MEAM для моделювання механічних властивостей TiB_2. З цією метою проводилися розрахунки кривих напруження-деформація для монокристалічного TiB_2 та двох полікристалічних зразків з різним розміром зерен. Відповідні параметри полікристалічних зразків TiB_2 показані на рис. 3.1.

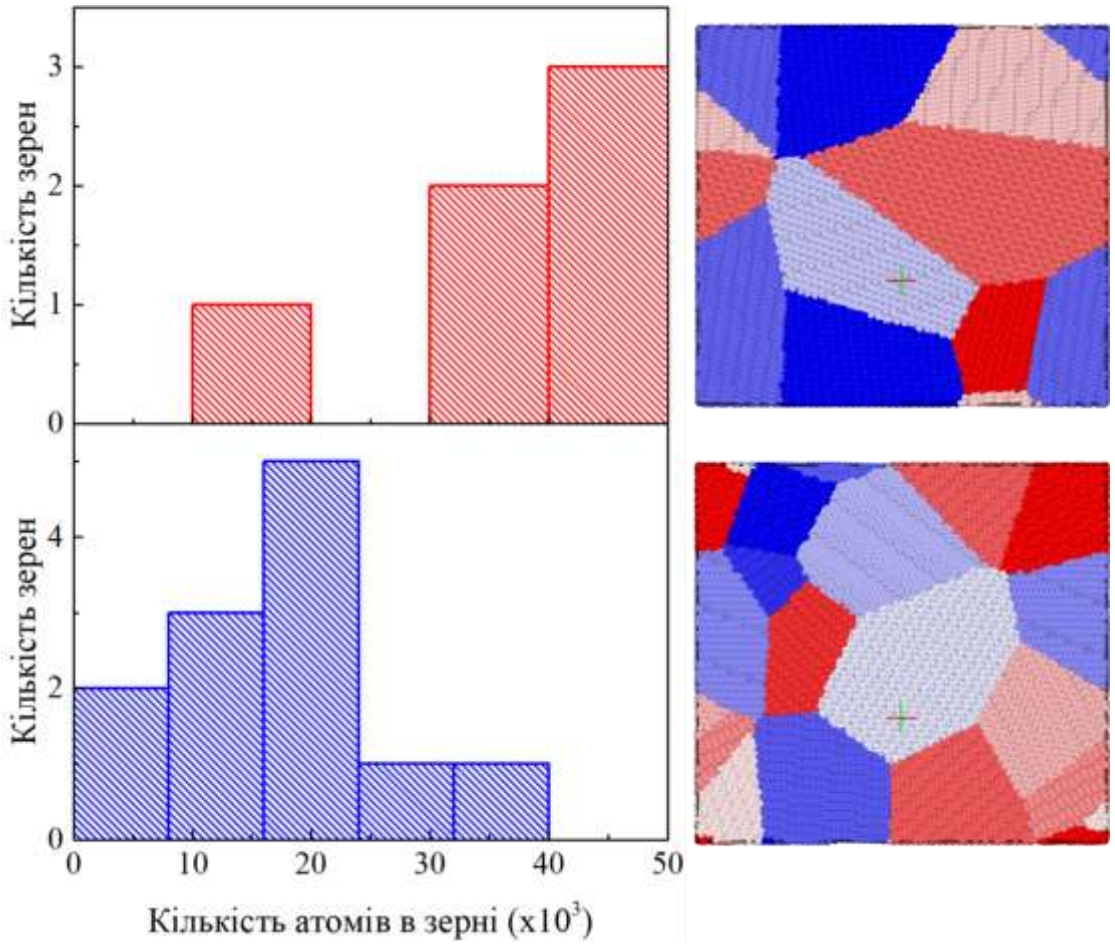

Рис.3.1. Атомні конфігурації (справа) та розподіл зерен за кількістю атомів для полікристалічних зразків TiB_2.

Перший зразок мав розміри зерен, що приблизно в два рази перевищували розміри зерен другого зразка. Зокрема, кількість атомів в зернах першого зразка становить 40-50 тисяч, тоді як в другому зразку – 15-

20 тисяч атомів. Для розрахунку кривих навантаження в роботі моделювався одновісний розтяг зразків з постійною швидкістю деформації $d\varepsilon/dt=10^8 c^{-1}$. В процесі розтягу обчислювалася відносна деформація ε зразків та розраховувалися внутрішні напруження σ за співвідношенням:

$$\sigma_{nn} = \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{N}\left(-m^{(i)}v_n^{2(i)} + \frac{1}{2}\sum_{j\neq i}^{N} F_n^{(i)(j)} r_n^{(i)(j)}\right), \qquad (3.1)$$

де N – загальна кількість атомів, V – об'єм зразка, $m^{(i)}$, $v^{(i)}$, $F^{(i)(j)}$ – компоненти маси та швидкості i-го атома, $r^{(i)(j)}$–міжатомна відстань. За отриманими значеннями σ та ε будувалися криві навантаження, вигляд яких для трьох зразків TiB_2 показано на рис.3.2

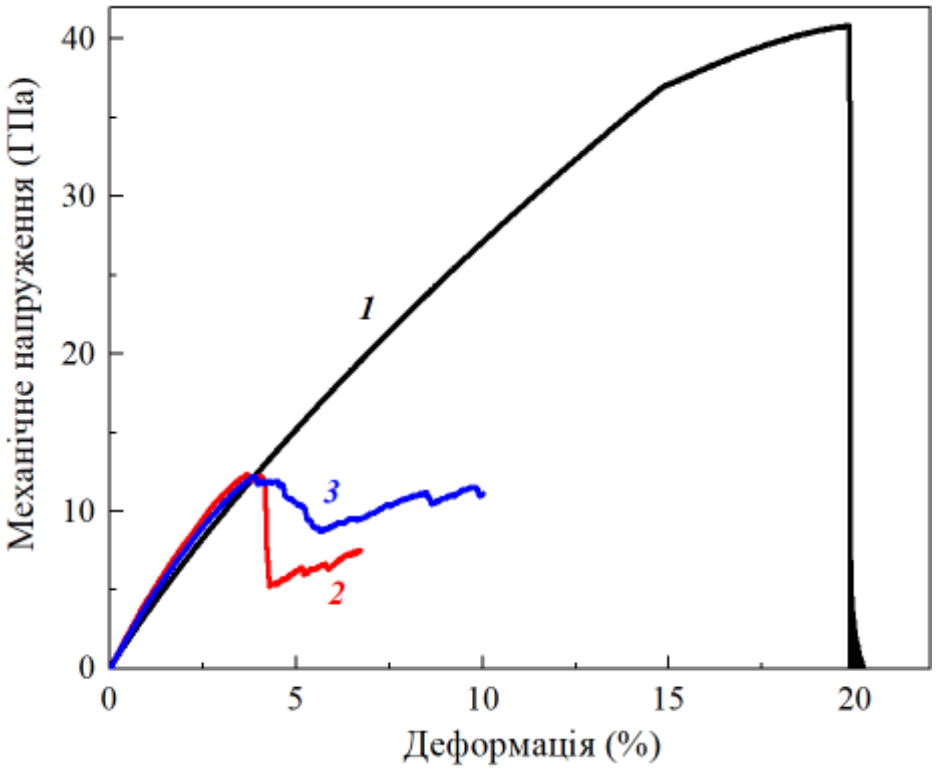

Рис.3.2. Криві навантаження для монокристалічного (крива 1) та полікристалічних зразків (криві 2,3) дибориду титану.

Для монокристалічного TiB_2 при зростанні деформації розтягу спостерігається зростання механічних напружень, причому залежність σ(ε) на

початковому етапі є лінійною, що відповідає ділянці пружної деформації, а далі відбувається поступове відхилення залежності від лінійної, що свідчить про появу пластичної деформації. При досягненні максимального напруження близько 40 ГПа, що відповідає деформації зразка майже 20% відбувається руйнування структури за крихким механізмом. Характерною особливістю полікристалічних зразків є суттєво менші значення напруження руйнування: в обох зразках ця величина не перевищує 12 ГПа, тобто є майже втричі меншою, ніж для монокристалу TiB_2.

З отриманих кривих σ(ε) в роботі було визначено модуль Юнга *E* досліджуваних зразків шляхом апроксимації початкових ділянок лінійною функцією $\sigma = E\,\varepsilon$. Отримані значення складають *E*=380 – 420 ГПа, що добре співвідноситься з наявними експериментальними даними, згідно яких *E* = 410 – 430 ГПа. Таким чином, отримані результати моделювання одновісного розтягу моно- і полікристалічного зразків дибориду титану якісно та кількісно відповідають експериментальним даним. Це дозволяє обрати запропонований потенціал MEAM для подальшого моделювання механічного відгуку структур на основі дибориду титану, зокрема, симуляції процесу поширення тріщини з зразках.

3.2 Моделювання росту тріщини в структурах TiB_2

Наступним кроком в роботі стало моделювання росту тріщини в моно- та полікристалічних зразках. Для цього, як було описано в розділі 2, створювався зародок тріщини, після чого проводився розтяг зразка з постійною швидкістю. В процесі моделювання також розраховувалися криві навантаження та аналізувалися атомні конфігурації зразків при русі тріщини. Відповідні результати для монокристалічного зразка представлені на рис. 3.3 та рис. 3.4. Стрілками на рис. 3.3 показані стани, які відповідають атомним конфігурація структури, що представлені на рис.3.4.

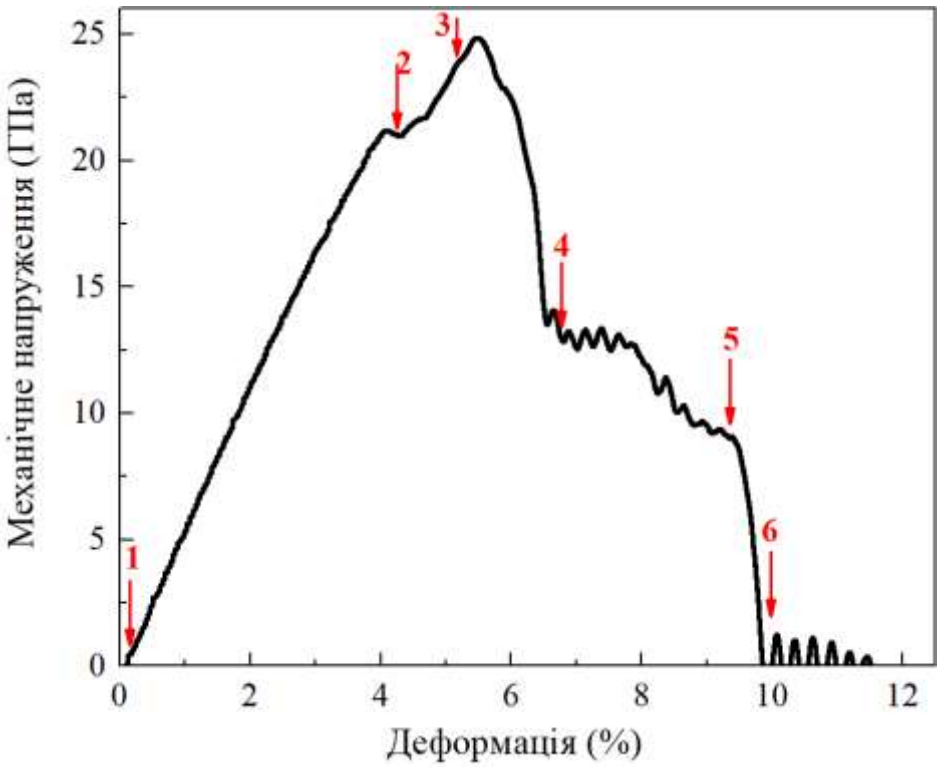

Рис. 3.3. Крива навантаження для монокристалічного дибориду титану, отримана в процесі моделювання руху тріщини.

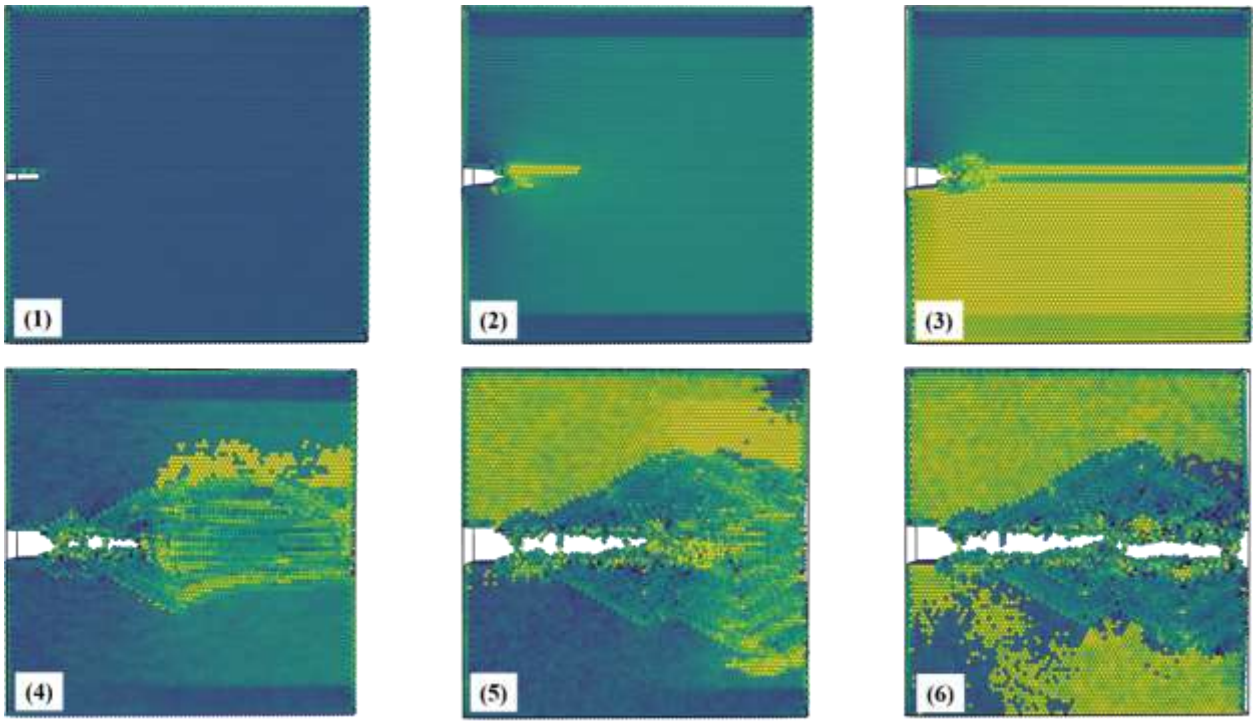

Рис. 3.4. Атомні конфігурації монокристалічного дибориду титану, отримані в процесі моделювання руху тріщини.

Як видно з рис.3.3, залежність σ(ε) є практично лінійною на ділянці між станами 1 та 2. На цьому етапі зародок тріщини не рухається, а відбувається лише накопичення механічних напружень (рис.3.4). При досягненні напруження близько 21 ГПа, на кривій навантаження спостерігається невеликий злам (стан 2). Відповідно до рис. 3.4, в цьому стані починає формуватися вістря тріщини навколо якого генеруються структурні дефекти. При цьому рух тріщини ще не спостерігається, а відбувається подальше накопичення напружень у зразку. Коли ці напруження досягають значень близько 25 ГПа (стан 3), в зразку спостерігається початок руху тріщини. При цьому на кривій навантаження спостерігається різке зниження напружень. В процесі руху тріщини навколо її вістря виникає сітка структурних дефектів, взаємодія з якими зумовлює осциляції на кривій напруження-деформація (стан 4). Подальший розтяг зразка зумовлює поширення тріщини через всю структуру (стан 5), внаслідок якого напруження в зразку спадають. На завершальній стадії тріщина «прошиває» зразок (стан 6) і відбувається його руйнування.

Аналогічні дослідження були проведені і на полікристалічних зразках. Результати моделювання для одного із зразків (з меншим розміром зерен) показано на рис.3.5 та рис.3.6. Початкова ділянка кривої напруження-деформація в цьому зразку характеризується наявністю осциляцій. Аналіз атомних конфігурацій в пакеті OVITOдозволив встановити, що такі осциляції пов’язані з релаксацією механічних напружень на границях зерен внаслідок перебудови атомів в цих областях. Після досягнення напружень близько 12 ГПа спостерігається незначне просування тріщини (стан 2), внаслідок чого напруження в структурі зменшуються. Однак рух тріщини відбувається лише впродовж короткого проміжку часу, допоки її вістря не досягне границі поділу зерен. На цій границі відбувається гальмування подальшого руху, внаслідок чого в зразку знову накопичуються напруження (стан 3) в процесі його розтягу.

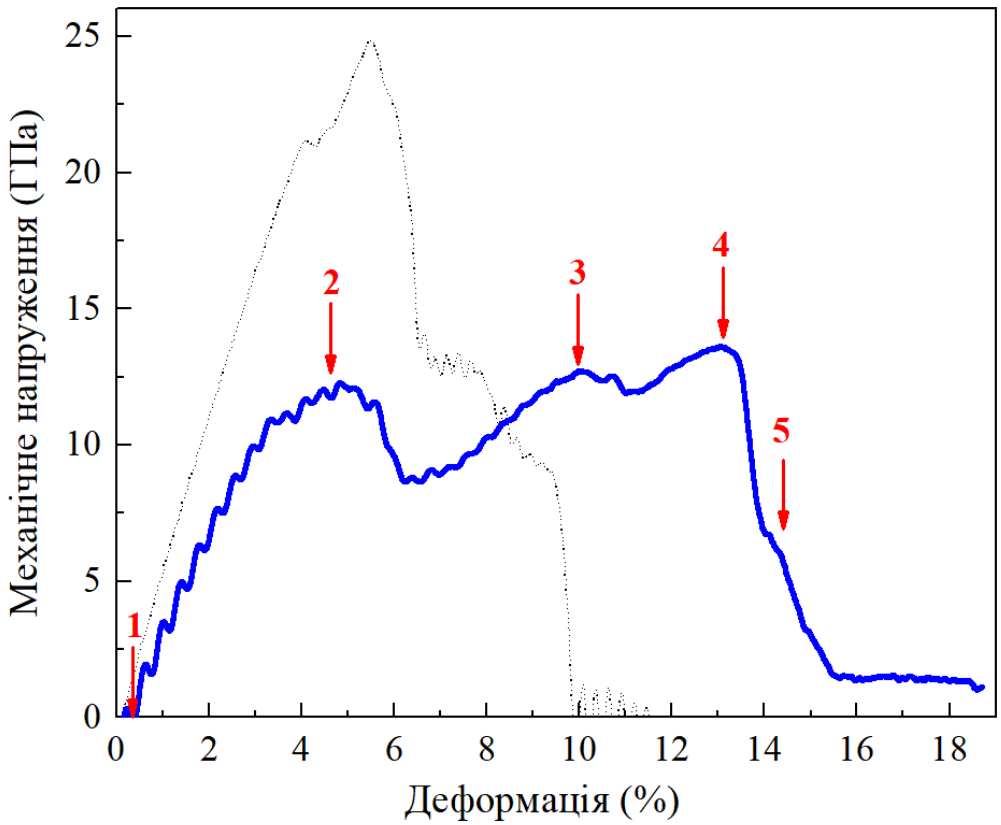

Рис.3.5. Крива навантаження для полікристалічного дибориду титану, отримана в процесі моделювання руху тріщини.

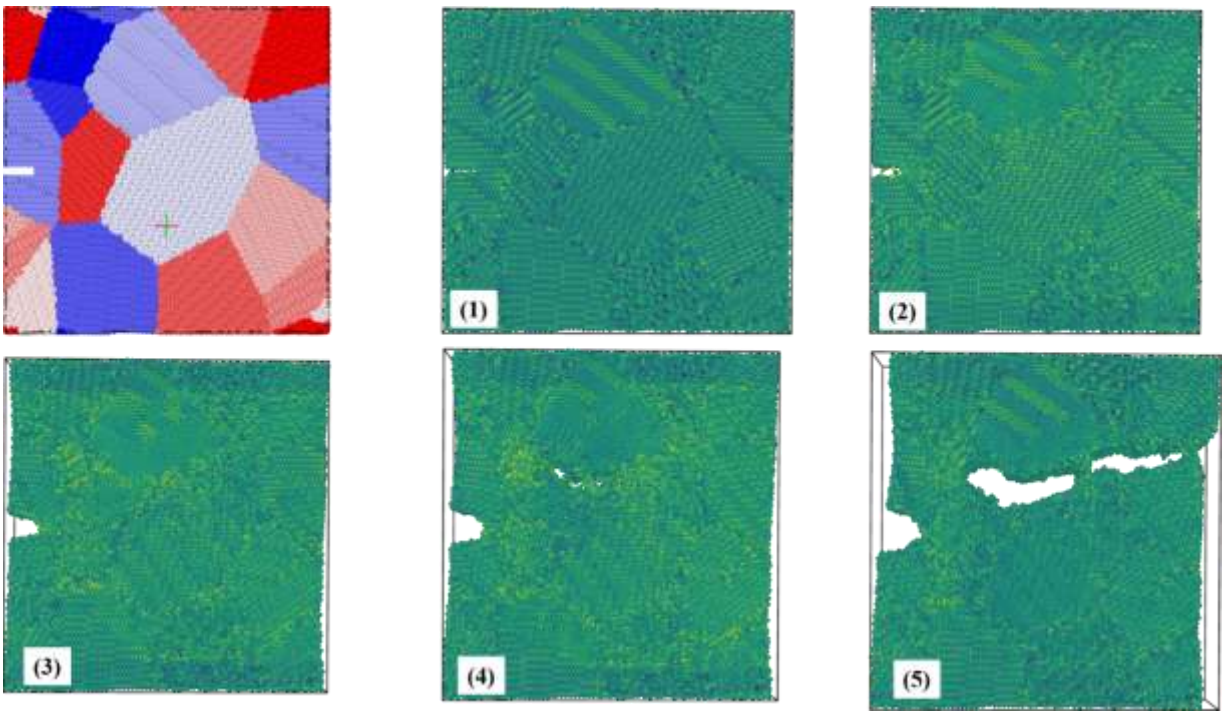

Рис.3.6. Атомні конфігурації монокристалічного дибориду титану, отримані в процесі моделювання руху тріщини.

При подальшій деформації полікристалічного зразка рух тріщини не відбувається, а спостерігається лише розширення її вістря. Натомість, стає помітним накопичення напружень в тих ділянках поблизу тріщини, де сходяться границі декількох зерен. На завершальному етапі (стан 4) саме в цих ділянках відбувається розрив міжатомних зв’язків та утворюється нова тріщина. В результаті на кривій напруження-деформація різко зменшуються внутрішні напруження у зразку. В процесі подальшої деформації ми спостерігаємо розвиток цієї новоутвореної тріщини вздовж границі зерен. Як результат, відбувається руйнування полікристалічного зразка.

ВИСНОВКИ

1. Проведено апробацію міжатомного потенціалу MEAM для розрахунку механічних властивостей TiB_2. Розрахований модуль Юнга для моно- і полікристалічного зразків складає $E = 380 – 420$ ГПа, що добре співвідноситься з наявними експериментальними значеннями $E = 410 – 430$ ГПа.

2. Змодельовано рух тріщини в моно-і полікристалічному зразках TiB_2. Показано, що напруження руху тріщини в монокристалічному TiB_2 дорівнює майже 25 ГПа і майже вдвічі перевищує аналогічне значення для зразка з нанорозмірними зернами.

3. Виявлено, що в полікристалічному зразку з нанорозмірними зернами рух тріщини при деформації може припинятися на границі зерен, а руйнування зразка відбувається внаслідок зародження нової тріщини в області контакту декількох зерен поблизу вістря первинної тріщин.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

[1]. Morsi K. Review: titanium–titanium boride composites. *Journal of Materials Science*. 2019. Vol. 54, no. 9. P. 6753–6771.

[2].Mechanical properties of casting titanium alloy matrix composites reinforced by WC and TiB2 ceramic particulates / J. Vairamuthu et al. *Materials Today: Proceedings*. 2022.

[3].Rupa P. K. P., Chakraborti P. C., Mishra S. K. Mechanical and deformation behaviour of titanium diboride thin films deposited by magnetron sputtering. *Thin solid films*. 2009. Vol. 517, no. 9. P. 2912–2919.

[4].X. Zhang, H.Q. RuMicrostructureandmechanicalpropertyofin-situsynthesizedSiC–TiB_2porousceramicas a function of TiB2 content. *Ceramics International*. 2022. Т. 48, № 6. С. 27605–27614.

[5].Effect of ceramic-binder interface on the mechanical properties of TiB2-HEA composites / S. Yadav et al. *Materials Science and Engineering: A*. 2022. P. 144059.

[6].Anisotropic binary TiB2–SiC composite powders: Synthesis and microwave absorption properties / S. Shen та ін. *Ceramics International*. 2022. Т. 48, № 6. С. 8579–8588.

[7]. Hydrogen-induced cracking of an aluminum single crystal: An atomistic simulation / G. H. Lee et al. *Computational Materials Science*. 2019. Vol. 169. P. 109084.

[8]. Pal S., Vijay Reddy K., Deng C. On the role of Cu-Zr amorphous intergranular films on crack growth retardation in nanocrystalline Cu during monotonic and cyclic loading conditions. *Computational Materials Science*. 2019. Vol. 169. P. 109122.

[9].Molecular dynamics simulations of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies / S. Chandra et al. *Computational Materials Science*. 2016. Vol. 117. P. 518–526.

[10]. Molecular dynamics simulation of grain boundary geometry on crack propagation of bi-crystal aluminum / W. Fang et al. *Materials Science and Engineering: A*. 2016. Vol. 666. P. 314–319.

[11].Study on micro-crack propagation behavior of single-crystal α-Ti under shear stress based on molecular dynamics / J. Li та ін. *Materials Today Communications*. 2020. Т. 25. С. 101622.

[12].Razmara N., Mohammadzadeh R. Effect of nitrogen content on the crack growth behavior in the Fe-N alloy at high temperatures via molecular dynamics simulations. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2018. Vol. 97. P. 30–37.

[13].Sung P.-H., Chen T.-C. Effects of quenching rate on crack propagation in NiAl alloy using molecular dynamics. *Computational Materials Science*. 2016. Vol. 114. P. 13–17.

[14].Zhang Y., Jiang S. Molecular Dynamics Simulation of Crack Propagation in Nanoscale Polycrystal Nickel Based on Different Strain Rates. *Metals*. 2017. Vol. 7, no. 10. P. 432.