



Обработка металлов (технология • оборудование • инструменты)

Сайт журнала: http://journals.nstu.ru/obrabotka_metallov



Моделирование атомных механизмов зарождения и развития пластической деформации в условиях сдвигового нагружения

Антон Никонов^{а, *}

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, пр. Академический, 2/4, г. Томск, 634055, Россия

^а  <https://orcid.org/0000-0002-0980-0317>,  anickonoff@ispms.ru

ИНФОРМАЦИЯ О СТАТЬЕ

УДК 539.372, 539.386, 621.7

История статьи:

Поступила: 18 июня 2018
 Рецензирование: 23 июля 2018
 Принята к печати: 25 июля 2018
 Доступно онлайн: 15 сентября 2018

Ключевые слова:

Пластическая деформация
 Дефектообразование
 Молекулярная динамика
 Сдвиговая деформация
 Локальное нагружение

Финансирование:

Исследования выполнены при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы, Проект Ш.23.2.4.

АННОТАЦИЯ

Введение. Методы поверхностной обработки материалов являются одним из эффективных приемов повышения их эксплуатационных характеристик. Одним из методов финишной обработки поверхностей деталей является метод поверхностного пластического деформирования (наноструктурирующее выглаживание), при котором формируется поверхностный слой с нанокристаллической структурой. Исследование структурных изменений, происходящих непосредственно в процессе такого выглаживания, представляется крайне сложной задачей. В связи с этим методы численного моделирования могут являться важным дополнением к экспериментальным исследованиям. **Цель работы:** численное исследование механического отклика металлического образца, находящегося в моно- и наноразмерном поликристаллическом состоянии на сдвиговое нагружение. **В работе исследованы** атомные механизмы зарождения и развития пластической деформации в кристаллическом материале в условиях нагружения, идентичных локальным напряжениям, возникающим при обработке материала поверхностным пластическим деформированием. **Методами исследования** являются высокопроизводительные параллельные вычисления с использованием метода молекулярной динамики. В качестве объекта исследования выбраны моно- и поликристалл ОЦК-железа. **Результаты и обсуждения.** Обнаружено, что в условиях локального сдвигового нагружения в исходно бездефектном кристалле α -железа возможно формирование системы взаимно пересекающихся дислокаций, что в дальнейшем приводит к разориентации отдельных частей кристаллита и формированию нанофрагментированной структуры поверхностного слоя. Вместе с тем результаты моделирования показывают, что в наноразмерном поликристалле сдвиг реализуется посредством двух конкурирующих механизмов: зернограницного проскальзывания, с одной стороны, и процесса рекристаллизации отдельных зерен – с другой. При росте зерен до размеров, сопоставимых с размерами исследуемого кристаллита, деформация в них начинает развиваться преимущественно за счет образования дефектов структуры подобно тому, как это происходит в монокристалле. Таким образом, размеры зерен и ориентация их кристаллической решетки по отношению к направлению прикладывания внешней нагрузки определяют тип реализующихся механизмов пластического деформирования материала поверхности. Полученные результаты могут быть использованы для лучшего понимания закономерностей процессов и механизмов, реализующихся в поверхностном слое материала в условиях обработки поверхностным пластическим деформированием.

Для цитирования: Никонов А.Ю. Моделирование атомных механизмов зарождения и развития пластической деформации в условиях сдвигового нагружения // Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты). – 2018. – Т 20, № 3. – С. 97–108. – doi: 10.17212/1994-6309-2018-20.3-97-108.

Введение

На сегодняшний день использование различных методов поверхностной обработки материалов является одним из эффективных приемов повышения эксплуатационных характеристик

различных деталей и изделий на их основе. Среди современных методов обработки поверхности различают термические, химико-термические, механические, термомеханические и другие способы воздействия на поверхностные слои металлов и сплавов с целью модификации их физико-механических и/или химических свойств [1–12]. Одним из высокопроизводительных методов финишной обработки поверхностей деталей в машиностроении является метод поверхностного пластического деформирова-

*Адрес для переписки

Никонов Антон Юрьевич, к.ф.-м.н., н.с.
 Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
 пр. Академический, 2/4,
 634055, г. Томск, Россия
 Тел.: 8 (3822) 286-973, e-mail: anickonoff@ispms.ru

ния, называемый также выглаживанием [8–12]. Установлено, что при таком способе воздействия материал в области контакта движущегося инструмента с поверхностью испытывает сложную систему одновременно действующих сдвиговых и сжимающих напряжений, идентичных по характеру с напряженным состоянием, реализуемым в условиях интенсивного пластического деформирования [8, 9]. Результатом такого воздействия является модификация поверхностного слоя с формированием ярко выраженной нанокристаллической структуры, ответственной за качественные изменения физико-механических и триботехнических свойств поверхности обрабатываемого материала.

Вместе с тем требования, предъявляемые, в частности, к современным фрикционным материалам, сочетают в себе целый комплекс параметров, обеспечение которых материалом с простой структурой зачастую становится невозможным. В этой связи все большую популярность приобретают композиционные фрикционные материалы, в которых каждый из составных элементов композиционной смеси несет свою функциональную нагрузку и способен обеспечить те или иные фрикционные свойства материала в целом [13, 14]. Фундаментальный научный интерес заключается в изучении механического поведения таких материалов в условиях сдвигового нагружения. Самостоятельной задачей является исследование влияния особенностей структуры фрикционного материала на характер его пластического деформирования. Как показывают те же результаты обработки поверхностным пластическим деформированием, наряду с работами других авторов, свойства материалов в нанокристаллическом состоянии существенно отличаются от материала, характеризующегося большим размером зерна [15, 16].

Исходя из сказанного цель настоящей работы заключалась в численном исследовании механического отклика металлического кристаллита, находящегося в моно- и нанокристаллическом состоянии на сдвиговое нагружение. В качестве объекта исследований в работе был выбран кристаллит α -железа, представляющий собой традиционный материал большинства современных фрикционных металлических материалов.

Методика исследований

Для изучения особенностей пластического деформирования кристаллита α -железа на атомном масштабе в условиях сдвиговой деформации применялся программный пакет LAMMPS [17]. Все расчеты были выполнены на суперкомпьютере *SKIF Cyberia* Томского государственного университета. Исследования проводились в два этапа. Первоначально исследовались процессы и механизмы, реализующиеся в исходно бездефектном монокристалле в условиях локального сдвигового нагружения. На втором этапе работы моделировалось механическое поведение наноразмерного поликристалла ОЦК-железа в условиях сдвиговой деформации.

На первом этапе в качестве объекта исследований был выбран идеальный кристаллит в форме параллелепипеда с размерами $40 \times 25 \times 15$ нм вдоль направлений лабораторной системы координат X , Y и Z соответственно. Структура образца создавалась таким образом, что кристаллографические направления $[100]$, $[010]$ и $[001]$ ОЦК-решетки соответствовали осям X , Y и Z . Изображение исходной структуры модельного образца представлено на рис. 1, а.

Процесс локального сдвигового нагружения поверхностного слоя был реализован с использованием тангенциально движущегося полевого индентора, имеющего форму цилиндра с радиусом R и осью, направленной вдоль оси Z . Взаимодействие индентора с поверхностью осуществлялось следующим образом. Если расстояние между атомом и осью индентора r становилось меньше равновесного значения R , то на этот атом действовала дополнительная сила, направленная от оси цилиндра. Величина отталкивающей силы рассчитывалась как $F = -k(r - R)^2$, где k – жесткость индентора. При этом при $r > R$ $F(r) = 0$. Радиус индентора составлял 4 нм. На этапе вдавливания индентор погружался в образец на глубину 3 нм, а скорость перемещения центра индентора вдоль свободной поверхности составляла 10 м/с, что близко к предельным скоростям, используемым на токарно-фрезерных центрах при поверхностной пластической обработке стальных изделий [8, 9].

Для ухода от наведенной симметрии численной модели в моделируемом кристаллите явно задавалась шероховатость поверхностного слоя

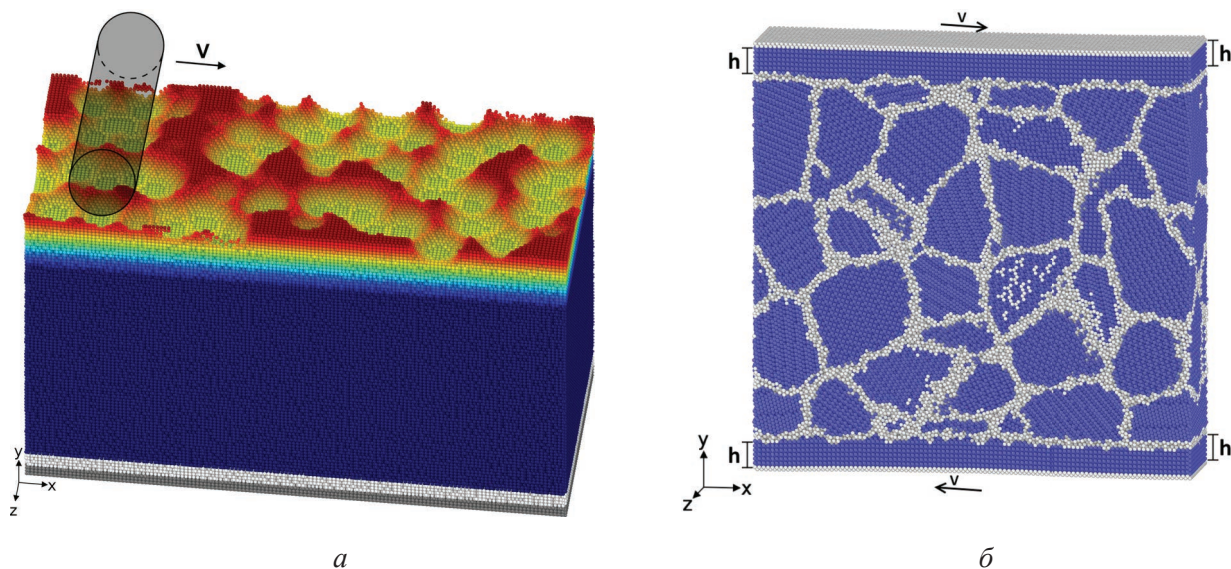


Рис. 1. Изображение исходной структуры образца при моделировании:

a – локального сдвигового нагружения монокристалла; *б* – сдвиговой деформации наноразмерного поликристалла α -железа. В случае поликристалла темным цветом отмечены атомы с локальной конфигурацией, отличной от ОЦК

Fig. 1. An image of the initial structure of the sample in the simulation of:

a – local shear loading of a single crystal; *б* – shear deformation of a nanoscale α -iron polycrystal. In the case of a polycrystal, atoms with a local configuration different to bcc are marked with a dark color

с максимальной глубиной 2,5 нм. В направлении оси Z моделировались периодические граничные условия, многократно повторяющие моделируемый фрагмент и тем самым позволяющие имитировать протяженность образца в заданном направлении. Остальные поверхности (вдоль X и Y) моделировались свободными. Нижний слой атомов (темный нижний слой на рис. 1, *a*) был неподвижным и имитировал подложку. Толщина слоя подложки составляла 0,73 нм. Над слоем подложки задавался специальный «демпфирующий» слой атомов (слой светло-серого цвета на рис. 1, *a*), использование которого позволило имитировать протяженность модельного образца вдоль оси Y . Толщина «демпфирующего» слоя составляла 1,45 нм. Температура образца поддерживалась в интервале от 300 до 350 К на протяжении всего процесса нагружения.

На втором этапе исследований в работе моделировался наноразмерный поликристалл α -железа. Образец представлял собой параллелепипед, содержащий около 1 млн атомов размерами $28,5 \times 28,5 \times 14,2$ нм вдоль направлений X , Y и Z соответственно. Для создания начальной поликристаллической структуры применялся метод ячеек Воронова, описанный в работе [18]. Результирующая структура образца перед

началом процесса сдвиговой деформации представлена на рис. 1, *б*. Для лучшей визуализации атомы, имеющие отличную от ОЦК локальную конфигурацию атомных связей, отмечены серым цветом. Средний размер зерен после релаксации поликристалла ОЦК-железа составлял 5 нм.

Задание сдвиговой деформации реализовывалось через создание специальных нагружаемых слоев. Для этого атомы, расположенные в верхнем и нижнем приповерхностных слоях толщиной h около 2 нм, были заменены на атомы бездефектного монокристалла α -железа той же толщины. Скорости атомов, попавших в нагружаемые слои, фиксировались. В направлении оси X для верхнего и нижнего слоя скорости атомов составляли 15 и -15 м/с соответственно. Таким образом, суммарная скорость проскальзывания вдоль X составляла 30 м/с. Вдоль направления Z скорости атомов обоих блоков были равны 0 м/с. В направлении Y положение и скорости атомов нагружаемых слоев моделировались свободными.

Для расчета взаимодействия между атомами в обоих случаях в работе использовался межатомный потенциал, построенный в рамках метода погруженного атома [19], который с высокой степенью точности описывает упругие и

поверхностные свойства, а также энергетические параметры дефектов моделируемой системы. Уравнения движения интегрировались с шагом по времени $\Delta t = 0,001$ пс. Полное число атомов моделируемой системы превышало 1,5 млн.

Визуализация и анализ структуры проводился с использованием программы OVITO [20]. Для изучения внутренней структуры применялся метод анализа ближайших соседей (common neighbor analysis – CNA) [21] и алгоритм извлечения дислокаций (dislocation extraction algorithm – DEA) [22]. Первый метод по координатам ближайших соседей позволяет определить тип кристаллической структуры (ОЦК, ГЦК, ГПУ), в узле которой расположен атом, а второй обнаруживает дислокации определенного вида в кристаллах. Пример использования CNA анализа продемонстрирован на рис. 1, б.

Результаты и их обсуждение

Моделирование локального сдвигового нагружения монокристалла

Анализ структуры моделируемого фрагмента в различные моменты времени позволил выявить процессы формирования дефектов структуры, которые зарождаются в области контакта индентора с поверхностью материала, а затем по мере продвижения индентора распространяются из поверхностного слоя в объем кристаллита. На рис. 2 показана конфигурация поверхностных атомов нагружаемого монокристалла и его внутренняя структура в различные моменты времени. Рис. 2, а и б соответствуют начальной стадии процесса обработки поверхности, а рис. 2, в и г – его завершению после однократного прохода индентора

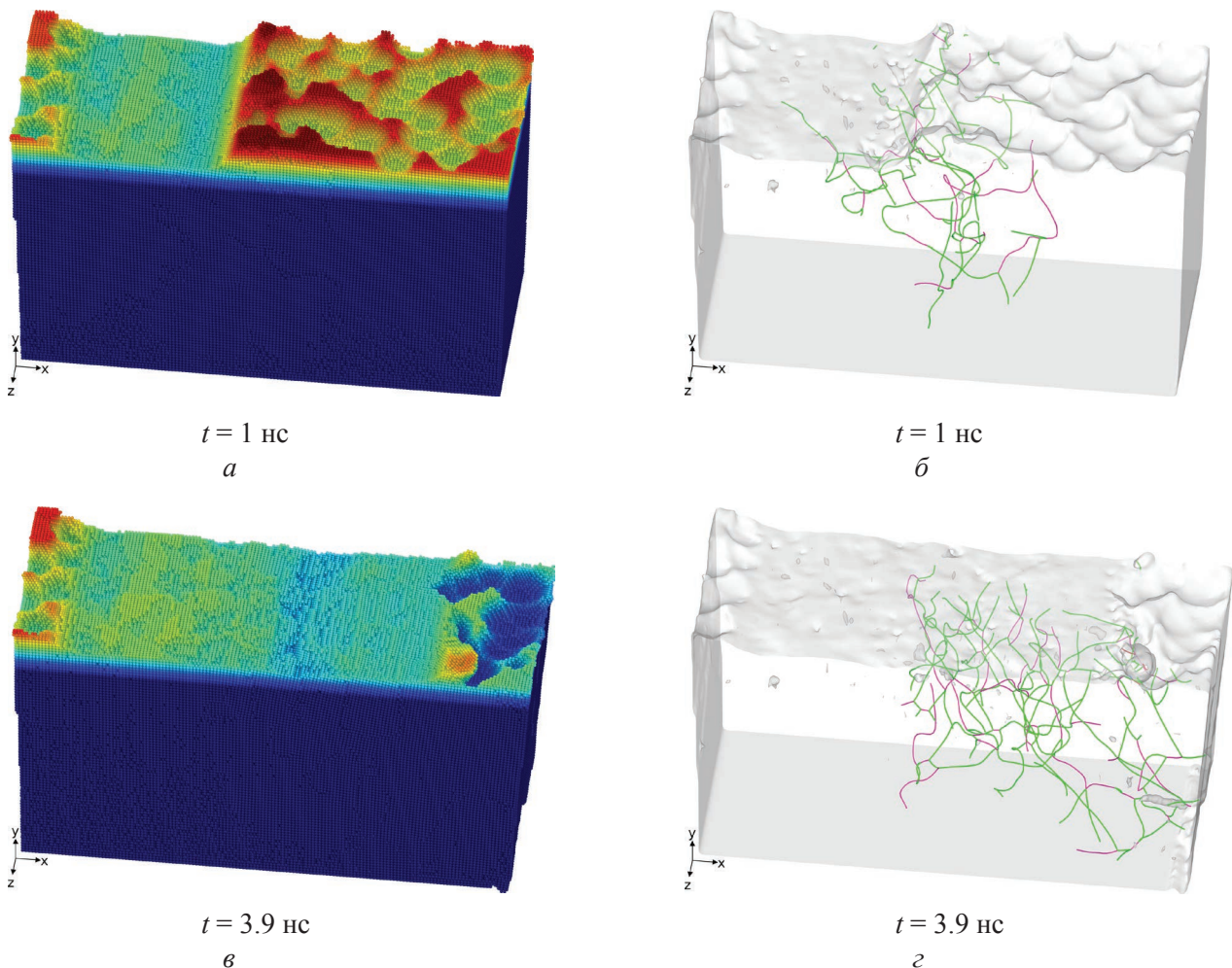


Рис. 2. Изображение рельефа свободной поверхности моделируемого фрагмента α -железа (а, в) и дислокационная структура образца в различные моменты времени (зеленым отмечены дислокации типа $1/2\langle 111 \rangle$, фиолетовым – $\langle 100 \rangle$) (б, г)

Fig. 2. An image of the free surface relief of the simulated α -iron fragment (а, в) and the dislocation structure of the sample over time (green marked dislocations type $1/2 \langle 111 \rangle$, purple – $\langle 100 \rangle$) (б, г)

тора. Видно, что в результате тангенциального движения индентора происходит снижение исходной шероховатости поверхности моделируемого кристаллита, что с учетом выбранных размеров рассматриваемого фрагмента имитирует реальный технологический процесс поверхностной пластической обработки на нанометровом масштабе.

Анализ структуры показал, что пластическая деформация реализуется за счет формирования в области контакта образца и индентора множества дислокаций, распространяющихся при дальнейшем нагружении в объем материала. Образовавшиеся краевые дислокации могут за счет периодических граничных условий проходить через весь моделируемый образец, формировать замкнутые дислокационные петли либо выходить на свободные поверхности. По мере прохождения индентора по поверхности обрабатываемого материала число дефектов растет и они образуют сложную систему переплетенных кривых (рис. 2, з).

Образование большого количества взаимно пересекающихся дефектов может приводить к формированию субзеренной структуры. Действительно, исследование структуры монокристалла α -железа показало, что результатом обработки поверхности поверхностным пластическим деформированием является наноструктурирование тонкого поверхностного слоя.

На рис. 3 показан фрагмент моделируемого кристаллита в момент времени $t = 7,8$ нс, что соответствует конечному этапу повторного прохождения индентора по поверхности обрабатываемого материала. Анализ атомной структуры показал, что субзерна (наноблоки) связаны между собой промежуточным слоем, структура которого за счет взаимного влияния наноблоков отличается от атомной конфигурации идеальной решетки. Таким образом, результатом локального сдвигового нагружения тангенциально движущимся индентором по поверхности исходно бездефектного кристаллита может являться формирование в поверхностном слое материала разориентированных субзерен, разделенных между собой интерфейсными слоями. Выявленные механизмы объясняют процесс модификации поверхностного слоя изделий, обрабатываемых различными современными методами поверхностного пластического деформирования, на-

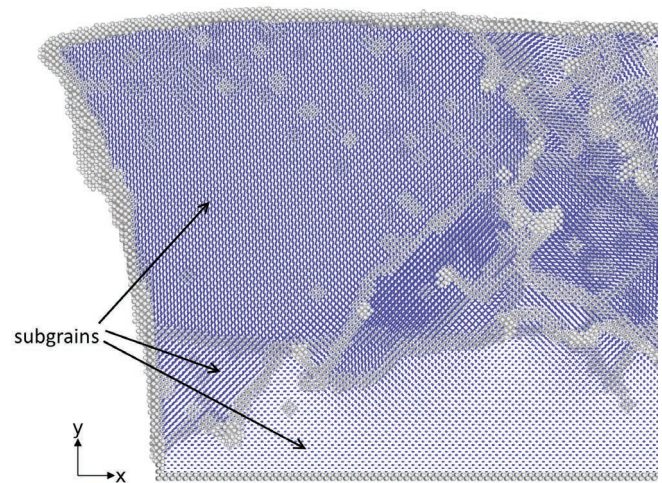


Рис. 3. Фрагмент моделируемого кристаллита после формирования субзеренной структуры. Серым цветом отмечены атомы со структурой, отличной от ОЦК

Fig. 3. Fragment of the simulated crystallite after the formation of the subgrain structure. Gray color indicates atoms with a structure different to bcc

пример, наноструктурирующим выглаживанием, когда нанофрагментация поверхностного слоя изделия существенно улучшает его триботехнические характеристики [8, 9].

Сдвиговая деформация наноразмерного поликристалла

Как было установлено в ходе первого этапа исследований, результатом локального сдвигового нагружения исходно бездефектного кристалла может являться формирование в поверхностном слое структуры разориентированных наноблоков с размерами до нескольких десятков нанометров. Очевидно, что этот процесс будет еще более выражен, если структура нагружаемого материала будет исходно содержать систему зерен, разделенных между собой межзеренными границами. С этой целью на следующем этапе исследований было рассмотрено механическое поведение наноразмерного поликристалла в условиях сдвиговой деформации.

На рис. 4 изображены три последовательных снимка структуры нанокристаллического ОЦК-железа, полученной в ходе сдвиговой деформации. Для лучшей визуализации изменений внутренней структуры показаны только атомы с локальной конфигурацией, отличной от ОЦК. Результаты анализа структуры позволили определить, что пластическая деформация в образце

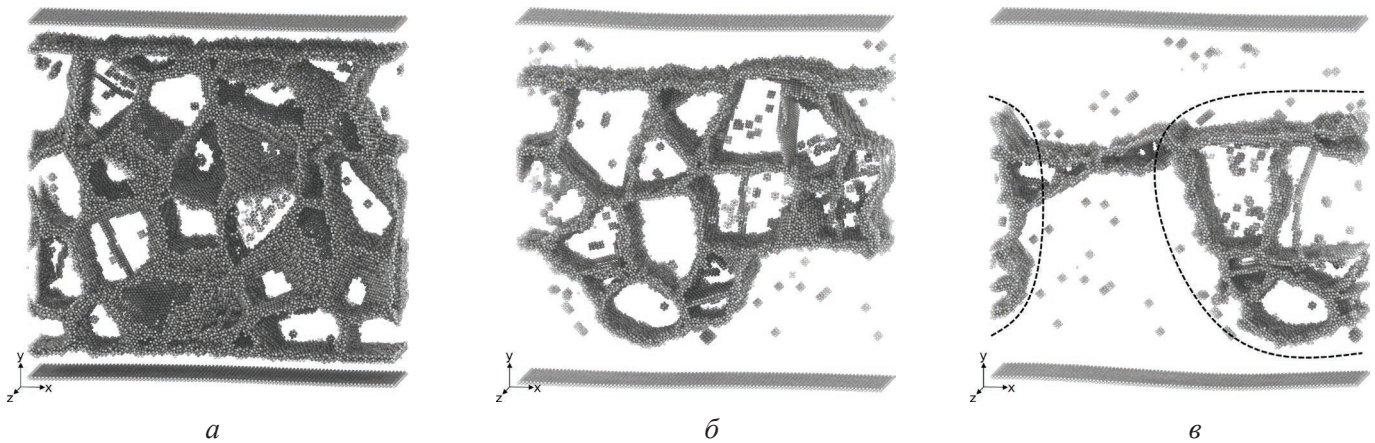


Рис. 4. Структура поликристаллического образца в начальный момент времени (а) и после нагружения в течение 1 нс (б) и 2 нс (в). Показаны только атомы со структурой, отличной от ОЦК

Fig. 4. The structure of the polycrystalline sample at the initial time (a) and after loading for 1 ns (b) and 2 ns (v). Only atoms with a structure different to bcc are shown

на начальном этапе реализуется за счет механизма межзеренного проскальзывания, а также за счет процесса рекристаллизации, приводящего к росту одних зерен поликристалла за счет других. Особенно заметен этот процесс вблизи нагружаемых слоев. В ходе движения размеры зерен, изначально представляющие собой нагружаемые слои, растут за счет перестройки атомной структуры и вовлечения атомов из ближайших зерен (видно из сравнения рис. 4, б и в с рис. 4, а). Следствием такой перестройки является перемещение межзеренных границ в направлении, перпендикулярном движению нагружаемого блока, подобно тому, как это наблюдалось в [23]. При дальнейшем нагружении наблюдается также переориентация зерен между нагружаемыми блоками. Анализ кристаллической структуры отдельных блоков показал, что с ростом сдвиговой деформации в них формируются дефекты структуры типа дислокаций, вакансии и двойники. После 2 нс нагружения рост зерен, исходно принадлежащих противоположным нагружаемым слоям, приводит к их объединению в единый кристаллит с выделением поликристаллического фрагмента, расположенного на рис. 4, в в центральной части кристаллита (отмечено пунктирной линией).

Для лучшей визуализации процесса деформации атомы, изначально расположенные в одном слое в плоскости YOZ толщиной 0,5 нм, маркировались цветом. Было выбрано три слоя, как показано на рис. 5, а. Анализ изменения положения отмеченных атомов позволяет лучше определить

процессы деформации. На рис. 5, б изображены зоны, в которых в течение 1 нс нагружения наблюдалось перемещение границ зерен (отмечены белым цветом), зернограницное проскальзывание (выделены синим цветом) и области, где происходил поворот зерна как целого (отмечены зеленым цветом). Перед объединением двух зерен, сформированных из нагружаемых слоев ($t = 2$ нс), наблюдается проскальзывание вдоль границы, проходящей через весь образец (рис. 4, в). На рис. 5, в эта область характеризуется одновременным смещением всех отмеченных атомов. Положение области отмечено стрелкой.

После формирования зерна, включающего в себя оба нагружаемых слоя, деформация главным образом реализуется за счет формирования множества дислокаций. Результатом данного процесса является переориентация кристаллической решетки зерна, как это было обнаружено ранее для монокристаллического образца (изображено на рис. 6). На рис. 7 отображены результаты расчета сдвиговых напряжений, возникающих в образце в ходе деформирования. Для сравнения приведены данные, полученные для монокристаллического образца. Видно, что на начальном этапе пластической деформации сдвиговые напряжения в монокристалле в 1,5 раза превышают значения для поликристаллического образца. После деформации $\epsilon \approx 2,1$ средние значения напряжений сравнялись. Этот момент соответствует процессу переориентации решетки в зерне и формированию границ зерен вблизи нагружаемых слоев подобно тому, как это происходит в монокристалле.

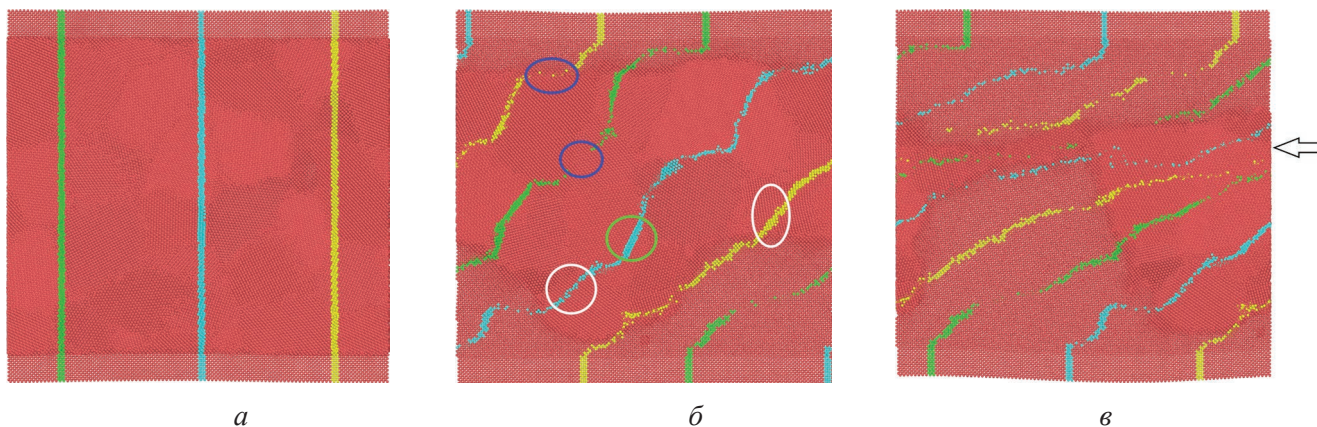


Рис. 5. Атомная структура образца в различные моменты времени:

a – 0 нс; *б* – 1 нс; *в* – 2 нс

Fig. 5. Atomic structure of the sample over time:

a – 0 ns; *б* – 1 ns; *в* – 2 ns

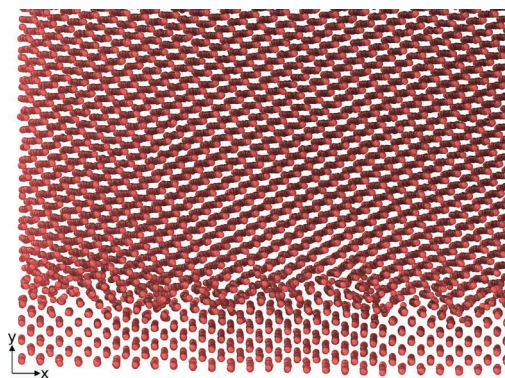


Рис. 6. Фрагмент результирующей структуры, образованной в монокристаллическом образце после сдвиговой деформации

Fig. 6. A fragment of the resulting structure formed in a single-crystal sample after shear deformation

Заключение

Полученные результаты наглядно демонстрируют, что процесс пластической деформации тонкого поверхностного слоя кристаллического материала в условиях сдвигового нагружения развивается за счет одновременной реализации различных конкурирующих механизмов, доля которых определяется как исходным размером зерен, так и их кристаллографической ориентацией по отношению к направлению прикладываемой нагрузки. В частности, для исходно нанофрагментированного (нанокристаллического) материала на ранней стадии преимущественно преобладает зернограничное проскальзывание и процесс рекристаллизации отдельных зерен. При достижении зернами определенных критических размеров либо если поверхностный слой нагружаемого материала исходно состоял из крупных зерен, то в ходе сдвиговой деформации в них преобладает формирование различных дефектов структуры, сопровождаемое разворотом крупных зерен. Этот вывод подтверждается зависимостью результирующих значений напряжений сопротивления сдвигу. Видно, что если на ранних стадиях, когда преимущественно реализуется зернограничное скольжение, уровень напряжений в поликристаллическом образце ниже, то при формировании крупных зерен уровень напряжений выравнивается до значений, наблюдаемых в наших вычислениях для монокристалла. Таким образом, процесс сдвигового деформирования поликристаллического матери-

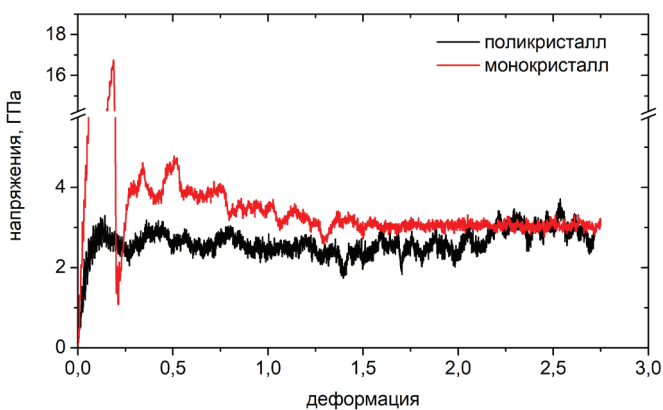


Рис. 7. Диаграмма зависимости напряжений от деформации кристалла

Fig. 7. Stress-strain diagram of crystals

ала определяется комплексом конкурирующих механизмов, зависящих от размеров и кристаллографической ориентации отдельных зерен. Полученные результаты могут быть использованы для лучшего понимания атомных механизмов генерации и эволюции дефектов структуры поверхностного слоя, реализующихся в условиях сдвиговой деформации.

Список литературы

1. Scale invariance of structural transformations in plastically deformed nanostructured solids / V.E. Panin, A.V. Panin, Yu.I. Pochivalov, T.F. Elsukova, A.R. Shugurov // *Physical Mesomechanics*. – 2017. – Vol. 20, iss. 1. – P. 55–68. – doi: 10.1134/S1029959917010052.
2. Oláh A., Croitoru C., Terean M.H. Surface properties tuning of welding electrode-deposited hardfacings by laser heat treatment // *Applied Surface Science*. – 2018. – Vol. 438. – P. 41–50. – doi: 10.1016/j.apsusc.2017.10.090.
3. Chemical treatment on aluminum alloy for hydrophobic surfaces / P. Sooksaen, O. Chulasinont, P. Janmat, W. Thovasakul // *Materials Today: Proceedings*. – 2017. – Vol. 4, iss. 5 (2). – P. 6528–6533. – doi: 10.1016/j.matpr.2017.06.163.
4. Влияние основных параметров процесса сварки трением с перемешиванием на дефектность структуры сварного соединения / О.В. Сизова, А.В. Колубаев, Е.А. Колубаев, А.А. Заикина, В.Е. Рубцов // *Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты)*. – 2017. – № 4 (77). – С. 19–29. – doi: 10.17212/1994-6309-2017-4-19-29.
5. Cold hole expansion effect on the fatigue crack growth in welds of a 6061-T6 aluminum alloy / K.C. Viveros, R.R. Ambriz, A. Amrouche, A. Talha, C. García, D. Jaramillo // *Journal of Materials Processing Technology*. – 2014. – Vol. 214, iss. 11. – P. 2606–2616. – doi: 10.1016/j.jmatprotec.2014.05.030.
6. Reduction of the residual stresses in cold expanded thick-walled cylinders by plastic compression / V.F. Skvortsov, A.O. Boznak, A.B. Kim, A.Yu. Arlyapov, A.I. Dmitriev // *Defence Technology*. – 2016. – Vol. 12, iss. 6. – P. 473–479. – doi: 10.1016/j.dt.2016.08.002.
7. Nikonov A.Y., Konovalenko I.S., Dmitriev A.I. Molecular dynamics study of lattice rearrangement under mechanically activated diffusion // *Physical Mesomechanics*. – 2016. – Vol. 19, iss. 1. – P. 77–85. – doi: 10.1134/S1029959916010082.
8. Kuznetsov V.P., Tarasov S.Yu., Dmitriev A.I. Nanostructuring burnishing and subsurface shear instability // *Journal of Materials Processing Technology*. – 2015. – Vol. 217. – P. 327–335. – doi: 10.1016/j.jmatprotec.2014.11.023.
9. Toward control of subsurface strain accumulation in nanostructuring burnishing on thermostrengthened steel / V.P. Kuznetsov, I.Y. Smolin, A.I. Dmitriev, S.Yu. Tarasov, V.G. Gorgots // *Surface & Coatings Technology*. – 2016. – Vol. 285. – P. 171–178. – doi: 10.1016/j.surfcoat.2015.11.045.
10. Modeling of nanostructuring burnishing on different scales / A.I. Dmitriev, V.P. Kuznetsov, A.Yu. Nikonov, I.Yu. Smolin // *Physical Mesomechanics*. – 2014. – Vol. 17, iss. 4. – P. 243–249. – doi: 10.1134/S1029959914040018.
11. Swirad S. The surface texture analysis after sliding burnishing with cylindrical elements // *Wear*. – 2011. – Vol. 271, iss. 3–4. – P. 576–581. – doi: 10.1016/j.wear.2010.05.005.
12. Grzesik W., Zak K. Modification of surface finish produced by hard turning using superfinishing and burnishing operations // *Journal of Materials Processing Technology*. – 2012. – Vol. 212, iss. 1. – P. 315–322. – doi: 10.1016/j.jmatprotec.2011.09.017.
13. Österle W., Dmitriev A.I., Kloß H. Does ultramild wear play any role for dry friction applications, such as automotive braking? // *Faraday Discussions*. – 2012. – Vol. 156. – P. 159–171. – doi: 10.1039/C2FD00117A.
14. Exploring the beneficial role of tribofilms formed from an epoxy-based hybrid nanocomposite / W. Österle, A.I. Dmitriev, T. Gradt, I. Häusler, B. Hammouri, P.I. Morales Guzman, B. Wetzel, D. Yigit, G. Zhang // *Tribology International*. – 2015. – Vol. 88. – P. 126–134. – doi: 10.1016/j.triboint.2015.03.006.
15. Li J., Chen S., Weng G.J. Significantly enhanced crack blunting by nanograin rotation in nanocrystalline materials // *Scripta Materialia*. – 2018. – Vol. 151. – P. 19–23. – doi: 10.1016/j.scriptamat.2018.03.030.
16. Dynamic deformation and failure of ultrafine-grained titanium / Z. Li, B. Wang, S. Zhao, R.Z. Valiev, K.S. Vecchio, M.A. Meyers // *Acta Materialia*. – 2017. – Vol. 125. – P. 210–218. – doi: 10.1016/j.actamat.2016.11.041.
17. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – Vol. 117. – P. 1–19. – doi: 10.1006/jcph.1995.1039.
18. Dmitriev A.I., Nikonov A.Yu., Österle W. Molecular dynamics sliding simulations of amorphous Ni, Ni-P and nanocrystalline Ni films // *Computational Materials Science*. – 2017. – Vol. 129. – P. 231–238. – doi: 10.1016/j.commatsci.2016.12.039.
19. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron / M.I. Mendeleev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sun,



M. Asta // *Philosophical Magazine*. – 2003. – Vol. 83. – P. 3977–3994. – doi: 10.1080/14786430310001613264.

20. *Stukowski A.* Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2010. – Vol. 18, iss. 1. – P. 15012. – doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.

21. *Honeycutt J.D., Andersen H.C.* Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters // *The Journal of Physical Chemistry*. – 1987. – Vol. 91, iss. 19. – P. 4950–4963. – doi: 10.1021/j100303a014.

22. *Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A.* Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2012. – Vol. 20, iss. 8. – P. 085007. – doi: 10.1088/0965-0393/20/8/085007.

23. *Dmitriev A.I., Nikonov A.Yu., Psakhie S.G.* Atomistic mechanism of grain boundary sliding with the example of a large-angle boundary $\Sigma=5$. Molecular dynamics calculation // *Physical Mesomechanics*. – 2011. – Vol. 14, iss. 1–2. – P. 24–31. – doi: 10.1016/j.physme.2011.04.004.

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

© 2018 Авторы. Издательство Новосибирского государственного технического университета. Эта статья доступна по лицензии Creative Commons «Attribution» («Атрибуция») 4.0 Всемирная (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)



Obrabotka metallov - Metal Working and Material Science

Journal homepage: http://journals.nstu.ru/obrabotka_metallov



Simulation of Atomic Mechanisms of Nucleation and Development of Plastic Deformation under Conditions of Shear Loading

Anton Nikonov^{a, *}

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, 2/4 Prospect Akademicheskii, Tomsk, 634055, Russian Federation

^a <http://orcid.org/0000-0002-0980-0317>, anickonoff@ispms.ru

ARTICLE INFO

Article history:

Received: 18 June 2018
Revised: 23 July 2018
Accepted: 25 July 2018
Available online: 15 September 2018

Keywords:

Plastic deformation
Defect formation
Molecular dynamics
Shear deformation
Local loading

Funding

The research was carried out with the financial support of the Program for Basic Scientific Research of the RAS on 2013-2020, Project III.23.2.4.

ABSTRACT

Introduction Methods of surface treatment of materials are one of the effective ways to improve its performance characteristics. One of the methods for finishing the surfaces of parts is the method of surface plastic deformation (nanostructuring burnishing), at which a layer with a nanocrystalline structure is formed. The study of the structural changes that occur directly in such burnishing process is extremely difficult. In this regard, numerical simulation methods can be an important addition to experimental studies. **The purpose of the work** is a numerical study of the mechanical response of a metal sample in a mono and nanoscale polycrystalline state to shear loading. In this paper, atomic mechanisms of nucleation and development of plastic deformation in a crystalline material under conditions of loading identical to local stresses arising during the processing of a material by surface plastic deformation **are investigated**. **The methods of investigation**. The research is carried out within the framework of high-performance parallel computations using the molecular dynamics method. The monocrystalline and polycrystalline body-centered cubic iron were chosen as the subject of research. **Results and Discussion**. The results of the studies show that under conditions of local shear loading in an initially defect-free α -iron crystal, it is possible to form a system of mutually intersecting dislocations, which subsequently leads to misorientation of individual parts of the crystallite and the formation of a nanofragmented structure of the surface layer. On the other hand, simulation data show that a shear in a nanoscale polycrystal is realized by the means of two competing mechanisms: grain boundary slip on one side and the process of recrystallization of individual grains on the other. With the growth of grains to dimensions comparable with the size of the crystallite under study, the deformation in it begins to develop mainly due to the formation of structure defects, just as it occurs in a single crystal. Thus, the grain sizes and the orientation of its crystal lattice in relation to the direction of the external load determine the type of plastic deformation mechanisms of the surface material being realized. The obtained results can be used for a better understanding of the laws of processes and mechanisms realized in the surface layer of the material under surface plastic deformation conditions.

For citation: Nikonov A.Y. Simulation of atomic mechanisms of nucleation and development of plastic deformation under conditions of shear loading. *Obrabotka metallov (tehnologiya, oborudovanie, instrumenty) = Metal Working and Material Science*, 2018, vol. 20, no. 3, pp. 97–108. doi: 10.17212/1994-6309-2018-20.3-97-108. (In Russian).

References

1. Panin V.E., Panin A.V., Pochivalov Yu.I., Elsukova T.F., Shugurov A.R. Scale invariance of structural transformations in plastically deformed nanostructured solids. *Physical Mesomechanics*, 2017, vol. 20, iss. 1, pp. 55–68. doi: 10.1134/S1029959917010052.
2. Oláh A., Croitoru C., Tieren M.H. Surface properties tuning of welding electrode-deposited hardfacings by laser heat treatment. *Applied Surface Science*, 2018, vol. 438, pp. 41–50. doi: 10.1016/j.apsusc.2017.10.090.

* Corresponding author

Nikonov Anton Yu., Ph.D., Researcher
Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of
the RAS,
2/4 pr. Akademicheskii,
634055, Tomsk, Russian Federation
Tel.: 8 (3822) 286-973, e-mail: anickonoff@ispms.ru

3. Sooksaen P., Chulasinont O., Janmat P., Thovasakul W. Chemical treatment on aluminum alloy for hydrophobic surfaces. *Materials Today: Proceedings*, 2017, vol. 4, iss. 5 (2), pp. 6528–6533. doi: 10.1016/j.matpr.2017.06.163.
4. Sizova O.V., Kolubaev A.V., Kolubaev E.A., Zaikina A.A., Rubtsov V.E. Effect of main parameters of the friction stir welding on structure imperfections of welded joint. *Obrabotka metallov (tekhnologiya, oborudovanie, instrumenty) = Metal Working and Material Science*, 2017, no. 4 (77), pp. 19–29. doi: 10.17212/1994-6309-2017-4-19-29.
5. Viveros K.C., Ambriz R.R., Amrouche A., Talha A., García C., Jaramillo D. Cold hole expansion effect on the fatigue crack growth in welds of a 6061-T6 aluminum alloy. *Journal of Materials Processing Technology*, 2014, vol. 214, iss. 11, pp. 2606–2616. doi: 10.1016/j.jmatprotec.2014.05.030.
6. Skvortsov V.F., Boznak A.O., Kim A.B., Arlyapov A.Yu., Dmitriev A.I. Reduction of the residual stresses in cold expanded thick-walled cylinders by plastic compression. *Defence Technology*, 2016, vol. 12, iss. 6, pp. 473–479. doi: 10.1016/j.dt.2016.08.002.
7. Nikonov A.Y., Konovalenko I.S., Dmitriev A.I. Molecular dynamics study of lattice rearrangement under mechanically activated diffusion. *Physical Mesomechanics*, 2016, vol. 19, iss. 1, pp. 77–85. doi: 10.1134/S1029959916010082.
8. Kuznetsov V.P., Tarasov S.Yu., Dmitriev A.I. Nanostructuring burnishing and subsurface shear instability. *Journal of Materials Processing Technology*, 2015, vol. 217, pp. 327–335. doi: 10.1016/j.jmatprotec.2014.11.023.
9. Kuznetsov V.P., Smolin I.Y., Dmitriev A.I., Tarasov S.Yu., Gorgots V.G. Toward control of subsurface strain accumulation in nanostructuring burnishing on thermostrengthened steel. *Surface & Coatings Technology*, 2016, vol. 285, pp. 171–178. doi: 10.1016/j.surfcoat.2015.11.045.
10. Dmitriev A.I., Kuznetsov V.P., Nikonov A.Yu., Smolin I.Yu. Modeling of nanostructuring burnishing on different scales. *Physical Mesomechanics*, 2014, vol. 17, iss. 4, pp. 243–249. doi: 10.1134/S1029959914040018.
11. Swirad S. The surface texture analysis after sliding burnishing with cylindrical elements. *Wear*, 2011, vol. 271, iss. 3–4, pp. 576–581. doi: 10.1016/j.wear.2010.05.005.
12. Grzesik W., Zak K. Modification of surface finish produced by hard turning using superfinishing and burnishing operations. *Journal of Materials Processing Technology*, 2012, vol. 212, iss. 1, pp. 315–322. doi: 10.1016/j.jmatprotec.2011.09.017.
13. Österle W., Dmitriev A.I., Kloß H. Does ultra-mild wear play any role for dry friction applications, such as automotive braking? *Faraday Discussions*, 2012, vol. 156, pp. 159–171. doi: 10.1039/C2FD00117A.
14. Österle W., Dmitriev A.I., Gradt T., Häusler I., Hammouri B., Morales Guzman P.I., Wetzel B., Yigit D., Zhang G. Exploring the beneficial role of tribofilms formed from an epoxy-based hybrid nanocomposite. *Tribology International*, 2015, vol. 88, pp. 126–134. doi: 10.1016/j.triboint.2015.03.006.
15. Li J., Chen S., Weng G.J. Significantly enhanced crack blunting by nanograin rotation in nanocrystalline materials. *Scripta Materialia*, 2018, vol. 151, pp. 19–23. doi: 10.1016/j.scriptamat.2018.03.030.
16. Li Z., Wang B., Zhao S., Valiev R.Z., Vecchio K.S., Meyers M.A. Dynamic deformation and failure of ultra-fine-grained titanium. *Acta Materialia*, 2017, vol. 125, pp. 210–218. doi: 10.1016/j.actamat.2016.11.041.
17. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, vol. 117, pp. 1–19. doi: 10.1006/jcph.1995.1039.
18. Dmitriev A.I., Nikonov A.Yu., Österle W. Molecular dynamics sliding simulations of amorphous Ni, Ni-P and nanocrystalline Ni films. *Computational Materials Science*, 2017, vol. 129, pp. 231–238. doi: 10.1016/j.com-matsci.2016.12.039.
19. Mendeleev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine*, 2003, vol. 83, pp. 3977–3994. doi: 10.1080/14786430310001613264.
20. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, vol. 18, iss. 1, p. 15012. doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
21. Honeycutt J.D., Andersen H.C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters. *The Journal of Physical Chemistry*, 1987, vol. 91, iss. 19, pp. 4950–4963. doi: 10.1021/j100303a014.
22. Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2012, vol. 20, iss. 8, p. 085007. doi: 10.1088/0965-0393/20/8/085007.

23. Dmitriev A.I., , Nikonov A.Yu., Psakhie S.G. Atomistic mechanism of grain boundary sliding with the example of a large-angle boundary $\Sigma=5$. Molecular dynamics calculation. *Physical Mesomechanics*, 2011, vol. 14, iss. 1–2, pp. 24–31. doi: 10.1016/j.physme.2011.04.004.

Conflicts of Interest

The author declare no conflict of interest.

© 2018 The Authors. Published by Novosibirsk State Technical University. This is an open access article under the CC BY license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).