

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА
НАНОИНДЕНТИРОВАНИЯ ТИТАНА С УПРОЧНЯЮЩИМ ПОКРЫТИЕМ
МЕТОДОМ ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ**

Аникеева Г.М.

научный руководитель д-р физ.-мат. наук Смолин А.Ю.

Томский государственный университет

В современном мире активно развиваются нанотехнологии, они проникли уже практически во все сферы промышленности: цифровая техника использует нанодетали, в качестве новых функциональных материалов изготавливаются наноплёнки, наноструктурные металлы, нанокompозиты и др. Новые материалы требуют развития соответствующих средств по изучению их физико-механических свойств. Как известно, свойства материала на наноуровне заметно отличаются от свойств на макро- и микроуровнях. Если последние можно найти в справочниках, то свойства материалов на наноуровне всё еще представляют собой малоизученную область в современной науке. Одним из способов исследования свойств нанообъектов является метод наноиндентирования. Под наноиндентированием принято понимать процесс изучения физико-механических свойств материалов при вдавливании специальных инденторов с глубиной отпечатков порядка 20 нм [1].

Процесс наноиндентирования широко изучается не только экспериментальными методами, но также и с помощью компьютерного моделирования, которое не только позволяет значительно сэкономить денежные ресурсы при проведении исследовательских работ, но и существенно расширить понимание сущности явлений, протекающих на столь малых масштабах. Используемые при этом методы можно разделить на методы макроуровня (основаны на подходах механики сплошных сред [2]) и микроуровня (молекулярная динамика [3]). Одним из новых методов компьютерного моделирования, занимающих промежуточное положение между макро- и микроуровнями, является метод подвижных клеточных автоматов (ПКА) [4]. Его применению к задачам наноиндентирования и посвящена данная работа.

В рамках метода ПКА материал рассматривается как набор дискретных элементов, взаимодействующих по определенным правилам. Математическая постановка задачи методом ПКА представляет собой задачу Коши для системы уравнений движения Ньютона-Эйлера, описывающих пространственное перемещение и вращение всех взаимодействующих элементов. Для решения поставленных в работе задач, силы и моменты, действующие между автоматами, записаны с учётом реализации модели упруго-идеальнопластической среды.

Геометрическая форма индентора и образца изучаемого материала при моделировании методом ПКА может задаваться либо графическими средствами специальной программы MCA_3D, либо импортироваться из DXF-файла. В данной

работе в качестве формы индентора использовалась пирамида Берковича [1], соответствующая геометрическая структура которого задавалась путём генерации DXF-файла. Задача решалась в трёхмерной постановке. При этом нагружение задавалось в скоростях движения индентора. Эта скорость на начальном этапе плавно нарастала до максимального значения, равного 1 м/с, а затем оставалась постоянной до достижения заданной глубины внедрения. Для разгрузки скорость плавно менялась от 1 м/с до -1 м/с.

Важной количественной характеристикой процесса наноиндентирования является зависимость силы P , действующей на индентор, от глубины вдавливания h . По таким диаграммам, полученным экспериментально, определяются физико-механические характеристики исследуемых материалов, в основном по методу Оливера-Фарра [1]. Построенная по результатам моделирования кривая $P-h$ для процесса наноиндентирования упруго-хрупкого покрытия на пластической титановой подложке представлена на рисунке 1. Диаграмма, изображенная на этом рисунке дает нам представление о зависимости силы вдавливания от глубины внедрения индентора на двух этапах: приложения нагрузки, а затем разгрузки. Характер представленной зависимости показывает, что деформация в рассматриваемой системе «покрытие-подложка» носит упруго-пластический характер.

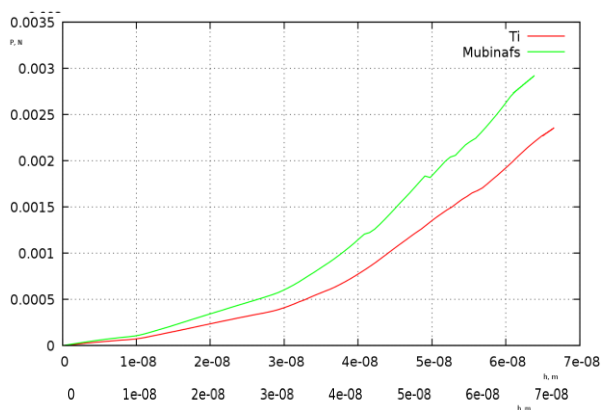


Рисунок 1. $P-h$ диаграмма процесса наноиндентирования хрупкого покрытия на титановой подложке.

Рисунок 2. $P-h$ диаграмма процесса наноиндентирования (нагрузка) образцов материала покрытия (Mubinafs) и титановой подложки (Ti).

На рисунке 2 представлены зависимости силы от глубины вдавливания при индентировании двух образцов из различных материалов: титана и упрочняющего покрытия. Из диаграмм видно, что упругие характеристики у материала покрытия выше, чем у титана.

Стоит отметить, что изучение методом наноиндентирования механических свойств тонких покрытий и плёнок представляет собой значительный интерес. Анализ литературы по экспериментальным данным, а также результатов проведённых

тестовых расчётов позволяет сделать вывод, что для адекватной оценки физико-механических характеристик упрочняющих покрытий методом Оливера-Фарра, необходимо чтобы они обладали одинаковыми упругими свойствами с подложкой [6]. Однако для подавляющего большинства реально используемых покрытий и плёнок это условие не выполняется. В то же время возможности компьютерного моделирования позволяют в настоящее время достаточно точно решать задачи по индентированию систем «покрытие-подложка» при различных соотношениях свойств материалов покрытия и подложки. При этом совместное использование моделирования и эксперимента может лечь в основу новых методик, взамен метода Оливера-Фарра, которые позволят корректно измерять свойства широкого спектра плёнок и покрытий. Кроме того, станет возможным прогнозировать с помощью компьютерного моделирования свойства гетерогенных материалов без проведения натурального эксперимента.

Таким образом, на основе проведённых исследований можно сделать вывод, что моделирование методом подвижных клеточных автоматов представляется перспективным для изучения физико-механических характеристик гетерогенных материалов и систем средствами наноиндентирования. В первую очередь это связано с возможностью данного метода моделировать разрушение тонких плёнок и покрытий.

Литература

1. Головин Ю.И. Наноиндентирование и его возможности. М.: Машиностроение, 2009. 22 с.
2. Кузнецова Т.А., Андреев М.А., Макарова Л.В. Моделирование пластичности тонких защитных покрытий при исследовании отпечатков микротвёрдости методом атомно-силовой микроскопии. БелСЗМ6, г. Минск. С. 54–59.
3. Матихин В.Б., Арзамасцев А.А. Двухмерная модель структуры материала в процессе наноиндентирования. Электронный журнал «Исследовано в России».
4. Псахье С.Г., Остермайер Г.П., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Смолин А.Ю., Коростелев С.Ю. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. I. Теоретическое описание // Физическая мезомеханика. 2000. Т. 3, № 2. С. 5–13.
5. Трубецков Д.И. Введение в синергетику. Хаос и структуры. М: Едиториал УРСС, 2004. 235 с.
6. Шугуров А.Р., Панин А.В., Оскомов К.В. Особенности определения механических характеристик тонких плёнок методом наноиндентирования // Физика твёрдого тела.

2008. Т.50, ВЫП. 6. С. 1007–1012.