

Potential Development for Alpha-Boron and Boron Carbide

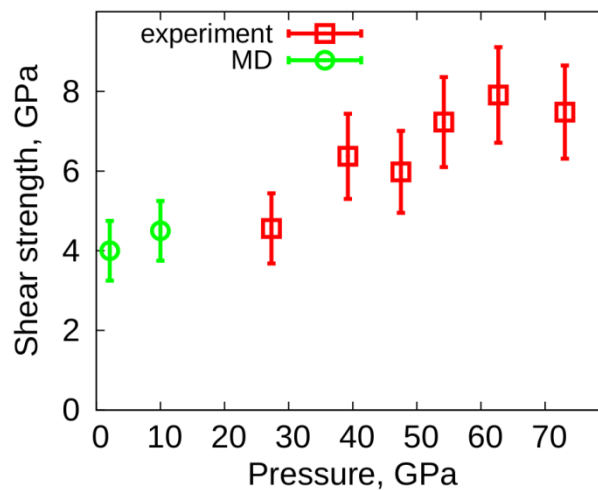
Pavel P. Pokatashkin, Pavel. Yu. Korotaev, Alexey V. Yanilkin

*FSUE Duhov All-Russia Research Institute of Automatics,
Moscow, 127055, Russia
p.a.pokatashkin@gmail.com*

Abstract

This work deals with grain sliding in alpha-boron and boron carbide. Molecular dynamic simulations are done with the potentials obtained during this work.

Keywords: boron, boron carbide, interatomic potentials, molecular dynamics.



Shear strength of deformed boron carbide

УДК 539.3

Построение потенциалов для альфа-бора и карбида бора

П.А. Покаташкин, П.Ю. Коротаев, А.В. Янилкин

ФГУП Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова,
Россия, Москва, 127055, Суцевская ул., 22
p.a.pokatashkin@gmail.com

Аннотация

В работе представлено исследование межзеренного трения в альфа-боре и карбиде бора. Моделирование производилось с помощью потенциалов межатомного взаимодействия, которые были получены в рамках данной работы.

Ключевые слова: бор, карбид бора, межатомные потенциалы, молекулярная динамика.

1. Введение

Карбид бора очень легкий (плотность 2.52 г/см^3), очень твердый (твердость $30 \div 40 \text{ ГПа}$) материал, который имеет высокую температуру плавления $\sim 2700 \text{ К}$ [1]. Кроме того, карбид бора имеет один из самых высоких среди керамик предел упругости Гюгонио $15 \div 17 \text{ ГПа}$, а также является весьма химически инертным материалом, в том числе и в агрессивных средах.

Сочетание этих свойств делает карбид бора привлекательным материалом для широкого спектра применений: в качестве баллистической защиты (используется как один из компонентов в бронежилетах высокого класса защиты), напыление пленки карбида бора на лезвия увеличивает коррозионную стойкость и предотвращает появление царапин. Порошки и пасты, содержащие карбид бора, используются для полировки и шлифования, в т.ч. изделий из очень твердых материалов. Также из карбида бора изготавливаются сопла для гидроабразивной резки.

Вышесказанное обуславливает интерес к карбиду бора, в т.ч. его поведению при высоких давлениях. Широко обсуждается вопрос о возможных фазовых переходах в карбиде бора, поскольку его поведение, например при баллистическом нагружении, отличается от многих керамик: например он демонстрирует разупрочнение. Одной из гипотез объяснения этого явления – является возможная аморфизация или иной фазовый переход, индуцированный давлением.

Карбид бора имеет сложную структуру состоящую из 15 атомов в элементарной ромбоэдрической ячейке. Основным структурным элементом является икосаэдр, состоящий из 12 атомов бора, находящимся в узлах решетки. «Цепочка» из 3 атомов углерода соединяет икосаэдры. Схожую структуру имеет α -фаза бора.

2. Потенциал межатомного взаимодействия

В связи с отсутствием потенциалов межатомного взаимодействия, позволяющим моделировать α -В и карбид бора, возникла необходимость создания такого рода потенциала. Поскольку создание потенциала для системы из одного химического элемента существенно проще, нежели для бинарной системы, вначале создавался потенциал для α -бора и проводилась его верификация. Кроме того, поскольку механические свойства этих материалов близки, расчеты по α -В могут служить ориентиром для свойств карбида бора. В качестве потен-

циальной формы использовался angular dependent potential (ADP) [2]. Эта потенциальная форма является модификацией известной модели погруженного атома (EAM) [3], позволяющая описывать нецентральные силы межатомного взаимодействия. Такая, довольно сложная форма необходима для описания довольно специфической структуры α -бора и карбид бора.

Целью было создание потенциала, способного описывать α -бор[4] и карбид бора в широком диапазоне температур и давлений, в том числе, состояния, возникающие при прохождении ударных волн. Подбор параметров проводился с помощью открытого свободно распространяемого кода PotFit (версии potfit-0.7.0)[5]. Программа реализует метод «согласования по силе» (force-matching method) минимизируя разницу отклонений в силах, напряжениях и энергиях, вычисленных с потенциалом и в исходных данных, полученных методом теории функционала плотности. Таким образом, построение потенциала происходит «из первых принципов» и не использует экспериментальные данные. Таким образом, последние могут использоваться в качестве верификации полученного потенциала.

3. Молекулярно-динамические расчеты

В связи с разрушением карбида бора под достаточно сильным ударно-волновым разрушением, возникает вопрос об исследовании критических значений напряжений, при которых возникает разрушение, а также о свойствах разрушенного материала. Корректный учет изменения свойств материала особенно важен в расчетах с сильными ударными волнами, поскольку вторая (и последующие ударные волны, отраженные от границ образца), строго говоря, будут распространяться по разрушенному материалу.

В различных экспериментальных работах по баллистическому соударению[6], наноиндентированию[7-9] наблюдается возникновение тонких аморфных полос, с характерной толщиной толщиной $1 \div 3$ нм. Таким образом, аморфные зоны являются границами зерен разрушенного материала. Это объясняет важность задачи о межзеренном трении в карбиде бора.

Модель задачи показана на рис. 1. Моделировался монокристалл, в форме вытянутого (вдоль оси z) параллелепипеда с размерами $1.5 \times 1.7 \times 18$ нм. Граничные условия по боковым граням (по x, y) – периодические, по оси z – свободные. Центр монокристалла расплавлялся путем добавления температуры, получая таким образом аформную межзеренную границу. Следует отметить, что экспериментально наблюдаемая разориентация кристаллографических осей по разные стороны от аморфных полос меньше 1 градуса [6], поэтому в данных расчетах ей было решено пренебречь. Атомы вблизи свободных границ зерен “замораживались” и атомы границы первого зерна получали компоненту скорости вдоль оси x равную 0.5 А/пс.

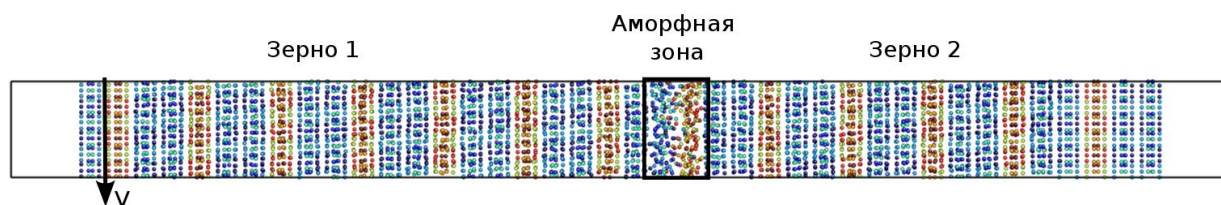


Рис. 1. Схема моделирования межзеренного трения

Исследовалась зависимость сдвиговой компоненты P_{xz} от времени. Она показана на рис. 2 при различных начальных степенях сжатия материала. После достижения критического значения, наблюдалось проскальзывание, и величина P_{xz} падала. Впоследствии она колебалась вблизи постоянного значения, которое можно интерпретировать как предел текучести межзеренного трения в материале.

С увеличением начального сжатия, предел текучести увеличивается. Однако, при достижении 40 ГПа, наблюдается, напротив, некоторое снижение. Из анализа атомистических конфигураций стало видно, что начиная с этих давлений в процессе проскальзывания происходит разрушение материала приводящий к росту аморфной зоны. Следует отметить, что при увеличении скорости скольжения, критическое давление, при котором начинается расширение аморфной зоны, уменьшается. Этот результат представляется важным, поскольку показывает, что с изменением зернистости исследуемых керамик, критические значения величин давлений, при которых меняется режим разрушения, могут меняться.

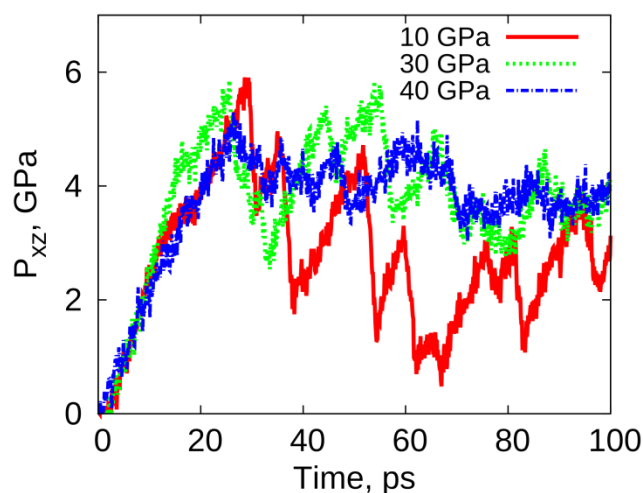


Рис. 2. Временная эволюция сдвиговой компоненты при различных изначальных сжатиях α -бора

Аналогичные расчеты были проведены и для карбида бора. Из сравнения с результатами экспериментальной работы [10] по т.н. *reshock-release experiments*, представленными на рис. 3, видно, что наблюдается разумное согласие с экспериментом. Однако, необходимо дальнейшее изучение зависимости предела текучести от температуры, давления, ориентации аморфной зоны и другими факторами.

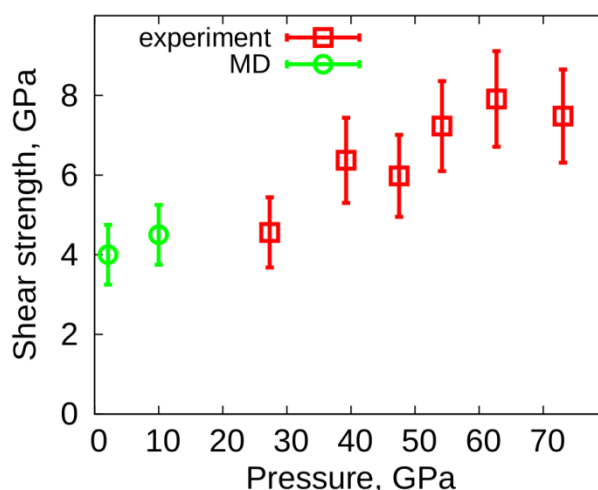


Рис. 3. Сопоставление предела текучести в карбиде бора с экспериментальными данными

4. Заключение

В ходе данной работы были разработаны потенциалы межатомного взаимодействия, позволяющие моделировать альфа-бор и карбид бора. С помощью полученных потенциалов, было произведено молекулярно-динамическое моделирование межзеренного трения. Исследование данного механизма представляется важным, т.к. позволяет получить критические параметры разрушенного материала. Полученные значения предела текучести для карбида бора находятся в разумном согласии с экспериментальными данными.

Было обнаружено наличие критического значения сжатия вещества, при котором в процессе межзеренного трения наблюдается рост межзеренной аморфной области. Величина критического давления уменьшается при увеличении скорости скольжения.

Литература

1. Domnich V. et al. Boron carbide: structure, properties, and stability under stress //Journal of the American Ceramic Society. – 2011. – Т. 94. – № 11. – Pp. 3605–3628.
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1551-2916.2011.04865.x/full>
2. Mishin Y., Mehl M. J., Papaconstantopoulos D. A. Phase stability in the Fe–Ni system: Investigation by first-principles calculations and atomistic simulations //Acta Materialia. – 2005. – Т. 53. – № 15. – Pp. 4029–4041. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645405002843>
3. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals //Physical Review B. – 1984. – Т. 29. – № 12. – P. 6443.
<http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.29.6443>
4. Pokataшкин П., Kuksin A., Yanilkin A. Angular dependent potential for α -boron and large-scale molecular dynamics simulations // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2015. – Т. 23. – № 4. – P. 045014. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0965-0393/23/4/045014>
5. Brommer P., Gähler F. Potfit: effective potentials from ab initio data //Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2007. – Т. 15. – № 3. – P. 295.
<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0965-0393/15/3/008/>
6. Chen M., McCauley J. W., Hemker K. J. Shock-induced localized amorphization in boron carbide //Science. – 2003. – Т. 299. – № 5612. – Pp. 1563–1566.
<http://www.sciencemag.org/content/299/5612/1563.short>
7. Ge D. et al. Structural damage in boron carbide under contact loading//Acta Materialia. – 2004. – Т. 52. – № 13. – Pp. 3921–3927. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645404002691>
8. Ghosh D. et al. Influence of stress state and strain rate on structural amorphization in boron carbide //Journal of Applied Physics. – 2012. – Т. 111. – № 6. – P. 063523.
<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/111/6/10.1063/1.3696971>
9. Reddy K.M. et al. Atomic structure of amorphous shear bands in boron carbide //Nature communications. – 2013. – Т. 4.
<http://www.nature.com/ncomms/2013/130919/ncomms3483/full/ncomms3483.html>
10. Vogler T.J., Reinhart W.D., Chhabildas L.C. Dynamic behaviour of boron carbide //Journal of applied physics. – 2004. – Т. 95. – № 8. – Pp. 4173–4183.
<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/95/8/10.1063/1.1686902>

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2015 г.