

УДК: 539.382.2

## Моделирование пластической деформации нанокристалла меди при одноосном растяжении

Т. А. Золотых<sup>а</sup>, А. Т. Косилов<sup>б</sup>, В. В. Ожерельев<sup>в</sup>

Воронежский государственный технический университет,  
Россия, 394026, г. Воронеж, Московский проспект, д. 14, учебный корпус №1

E-mail: <sup>а</sup>timofei0@mail.ru, <sup>б</sup>kosilovat@mail.ru, <sup>в</sup>ozher@mail.ru

Получено 27 февраля 2013 г.,  
после доработки 17 апреля 2013 г.

Проведено компьютерное моделирование пластической деформации нанокристалла ГЦК меди в процессе одноосного растяжения в направлении [001] с использованием методов молекулярной динамики и статической релаксации. Показано, что за пластическую деформацию ответственно термоупругое мартенситное превращение, решетка ГЦК перестраивается в решетку ГПУ. Установлены ориентационные соотношения контактирующих фаз.

Ключевые слова: мартенситное превращение, деформация, компьютерное моделирование, молекулярная динамика, нанокристалл, одноосное растяжение

## Simulation of copper nanocrystal plastic deformation at uniaxial tension

T. A. Zolotykh, A. T. Kosilov, V. V. Ozherelyev

*Voronezh state technical university, 14 Moskovskiy pr-t, Voronezh, 394026, Russia*

**Abstract.** — Computer simulation of plastic deformation of FCC copper nanocrystal in the process of uniaxial tension in a direction [001] is performed by methods of molecular dynamics and a static relaxation. It is shown that thermoelastic martensite transformation is responsible for plastic deformation, FCC lattice is reconstructed into HCP lattice. Orientation relationship of contacting phases is identified.

Keywords: martensite transformation, deformation, computer simulation, molecular dynamics, nanocrystal, uniaxial tension

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5, no. 2, pp. 225–230 (Russian).

## Введение

Процессы пластической деформации в массивных кристаллических материалах к настоящему моменту детально изучены. Кинетику деформации кристаллов под нагрузкой, их способность к пластической деформации определяют процессы зарождения дислокаций, взаимодействия с локальными центрами и полем внутренних напряжений [Келли, Гровс, 1974]. В наноразмерных объектах так же возможны процессы зарождения и беспрепятственного прохождения дислокаций в своих плоскостях скольжения под действием приложенной нагрузки. Однако, в связи с доминирующим влиянием поверхности трудно представить формирование устойчивой дислокационной структуры в таких объектах.

Еще одним механизмом пластического течения является мартенситное превращение, при котором деформация в направлении приложенной нагрузки достигается за счет перестройки атомной структуры путем перемещения когерентных границ раздела фаз.

Поскольку теоретические и экспериментальные исследования наноразмерных материалов сопряжены с известными трудностями [Келли, Гровс, 1974], при их изучении часто прибегают к методам компьютерного моделирования [Kadau et al., 2004; Zhao et al., 2009; Коноваленко и др., 2011; Лагунов, Синани, 2001; Лобастов, Шудегов, Чудинов, 2000; Норман, Стегайлов, Янилкин, 2007; Junge, Molinari, 2012].

Атомистическое моделирование методом молекулярной динамики позволяет раскрыть механизмы процессов, протекающих в наноматериалах под воздействием нагрузки, прогнозировать их эксплуатационные и функциональные характеристики. Так, в работе [Kadau et al., 2004] выполнены молекулярно-динамические исследования эволюции атомной структуры нанокристаллического алюминия в условиях пластических деформаций; в [Zhao et al., 2009] изучено влияние размерных эффектов на механизмы деформации монокристалла меди, содержащего нанопору; в [Коноваленко и др., 2011] проведено молекулярно-динамическое моделирование зарождения и развития пластической деформации в кристаллите титана при одноосном растяжении с различными скоростями. В работе [Евтеев и др., 2006] показано, что пластическое формоизменение нанокристаллов железа ориентации [001] в условиях одноосного растяжения при  $T = 300$  К происходит путем последовательной серии термоупругих мартенситных превращений.

Данная работа посвящена изучению в рамках метода молекулярной динамики (МД) структурных и фазовых превращений наноразмерного нитевидного кристалла ГЦК-меди ориентации [001] в условиях одноосного растяжения при температуре 300 К.

## Методика компьютерного эксперимента

Исходная модель кристаллита ГЦК-меди содержала 20000 атомов и имела форму параллелепипеда, длины ребер которого равнялись  $L_X = L_Y = 23$  Å,  $L_Z = 359.69$  Å. Методика МД расчета состояла в численном интегрировании уравнений движения с временным шагом  $\Delta t = 1.523 \times 10^{-15}$  с по алгоритму Верле в скоростной форме [Verlet, 1967].

Для описания взаимодействия атомов меди использовался метод погруженного атома [Daw, Baskes, 1983; Daw, Baskes, 1984]. В начальный момент времени атомам сообщались скорости согласно распределению Максвелла для заданной температуры 300 К. Далее моделируемая система достигала состояния равновесия при постоянной температуре. Затем кристалл подвергался одноосному растяжению с постоянной скоростью деформации в направлении оси  $Z$  при заданной температуре. Этот процесс носил циклический характер и был разделен на следующие этапы: однородная мгновенная деформация на величину  $\Delta \varepsilon = 0.001$ , установление теплового равновесия в системе при постоянной температуре в течение  $1000 \times \Delta t$  и последующий отжиг в адиабатических условиях на протяжении  $9000 \times \Delta t$ . Таким образом, продолжительность одного цикла составляла  $10000 \times \Delta t$ , или  $1.523 \times 10^{-11}$  с, а средняя скорость деформации —  $6.6 \times 10^7$  с<sup>-1</sup>. Чтобы убрать

влияние тепловых колебаний атомов на рассчитываемые характеристики, после каждого цикла систему методом статической релаксации переводили в состояние с  $T = 0$  К, предоставляя возможность атомам занять равновесные положения в локальных потенциальных ямах.

В процессе компьютерного эксперимента по изучению структурных превращений при одноосной деформации кристалла ГЦК-меди осуществлялся непрерывный контроль за термодинамическими характеристиками системы, функцией радиального распределения атомов (ФРРА)  $\rho(r)$ , стереографическими проекциями основных кристаллографических направлений, а также проводился визуальный анализ расположения атомов. После проведения процедуры статической релаксации определялась средняя величина напряжения  $\sigma$  в направлении оси растяжения, а также средняя величина потенциальной энергии  $U_0$ , приходящаяся на один атом.

## Результаты и их обсуждение

Были построены зависимости напряжения  $\sigma$  и потенциальной энергии  $U_0$  модели нанокристалла меди ориентации [001] от деформации  $\varepsilon$  при температуре  $T = 300$  К (см. рис. 1). Характер этих зависимостей, существенно отличающийся от подобных зависимостей для массивных монокристаллов [Губкин, 1961], позволяет выделить несколько стадий упругой и пластической деформации (I–IV на рис. 1).

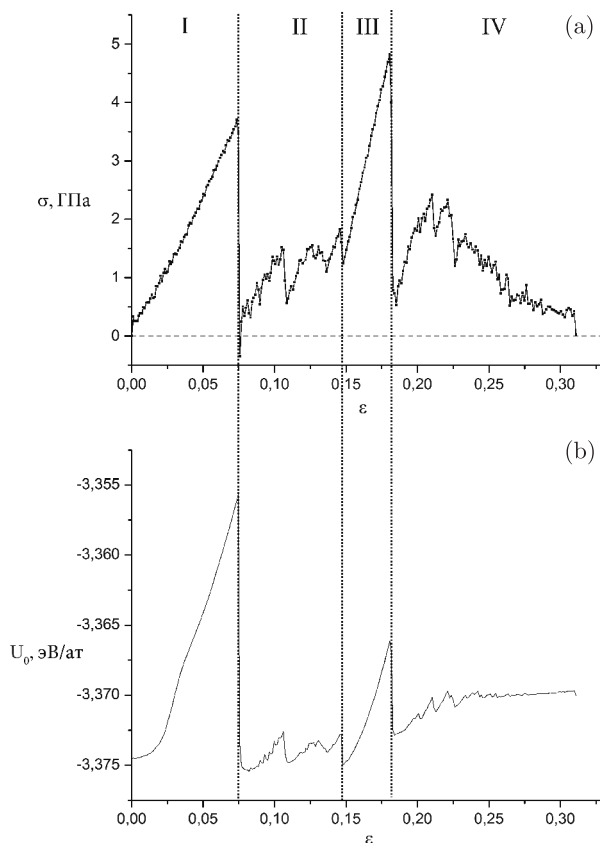


Рис. 1. Зависимость напряжения  $\sigma$  в направлении оси растяжения от деформации  $\varepsilon$  при  $T = 300$  К (a); зависимость потенциальной энергии системы  $U_0$ , приходящейся на один атом, от деформации  $\varepsilon$  (b)

Линейно возрастающий характер зависимости  $\sigma$  от  $\varepsilon$  на стадии I соответствует упругой деформации ГЦК-меди ориентации [001]. При деформациях, соответствующих стадии II, в кристалле происходит фазовый переход, стимулированный упругими напряжениями. С помощью анализа положения пиков на ФРРА (см. рис. 2) и метода анализа общих ближайших соседей [Faken, Jonsson, 1994] было установлено, что новая фаза имеет ГПУ структуру.

На рисунке 2 приведены две ФРРА: для исходной ГЦК-фазы и образовавшейся ГПУ-фазы; пики ФРРА соответствуют кратчайшим межатомным расстояниям в указанных направлениях.

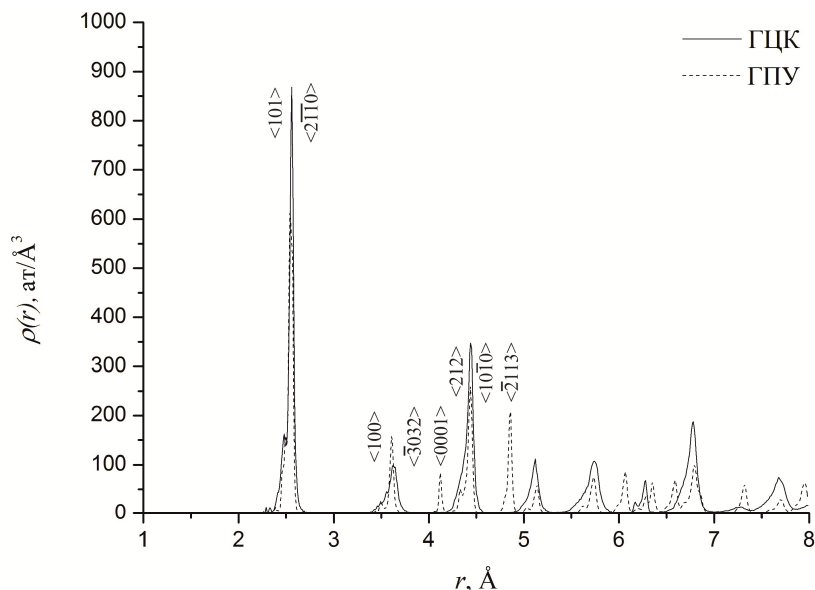


Рис. 2. Функции радиального распределения атомов  $\rho(r)$  ГЦК и ГПУ фаз при  $\varepsilon = 0.074$

Зарождение новой ГПУ-фазы произошло при  $\varepsilon = 0.074$  (см. рис. 3), а полностью перестройка завершилась при  $\varepsilon = 0.148$ . Упругая деформация, соответствующая «зубу текучести» при  $\varepsilon = 0.074$  и  $\sigma = 3.7$  ГПа, переходит в пластическую деформацию в результате резкого сброса напряжения. (Уход кривой  $\sigma(\varepsilon)$  в область отрицательных значений объясняется инерционными эффектами).

Для определения ориентационных соотношений были построены стереографические проекции основных направлений ГЦК и ГПУ решеток (см. рис. 4). Выполняются следующие ориентационные соотношения:  $(001)_{\text{ГЦК}} \parallel (0001)_{\text{ГПУ}}$ ,  $[010]_{\text{ГЦК}} \parallel [\bar{1}2\bar{1}0]_{\text{ГПУ}}$ . Небольшое отклонение, на величину  $\sim 1.5^\circ$ , от точного выполнения приведенного соотношения связано с наблюдаемыми в ходе эксперимента локальными изгибами образца на границах раздела фаз.

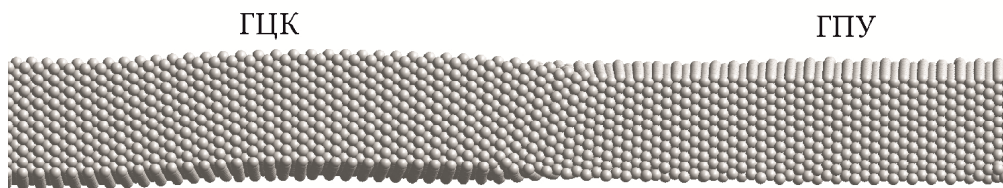


Рис. 3. Область когерентного сопряжения ГЦК и ГПУ фаз при  $\varepsilon = 0.074$

Для иллюстрации процесса перестройки структуры при данном фазовом переходе из модели был выделен фрагмент структуры в области исходной ГЦК-фазы (рис. 5a) и фрагмент, образованный теми же атомами после перехода в ГПУ-фазу (рис. 5b). Из рисунка 5 видно, что фазовый переход носит мартенситный характер и его формально можно разбить на два этапа: деформацию Бейна и взаимное смещение базисных плоскостей в направлении  $[100]$ . Деформация Бейна характеризуется растяжением решетки в направлениях  $[100]$  и  $[001]$  на величину  $\sqrt{3}/2 - 1 \approx 0.22$  и  $(\sqrt{2}/3 - 1/\sqrt{2})/(1/\sqrt{2}) \approx 0.15$  соответственно и сжатием в направлении  $[010]$  на величину  $1 - \sqrt{2}/2 \approx 0.29$ . В результате в каждой плоскости  $(001)$  формируется атомная структура в виде правильных шестиугольников (атомы 1–6). Отметим, что рассчитанная величина пластической деформации растяжения  $\varepsilon \approx 0.15$  в направлении  $[001]$  практически

совпадает с величиной деформации  $\varepsilon = 0.148$ , при которой завершается вторая стадия деформации.

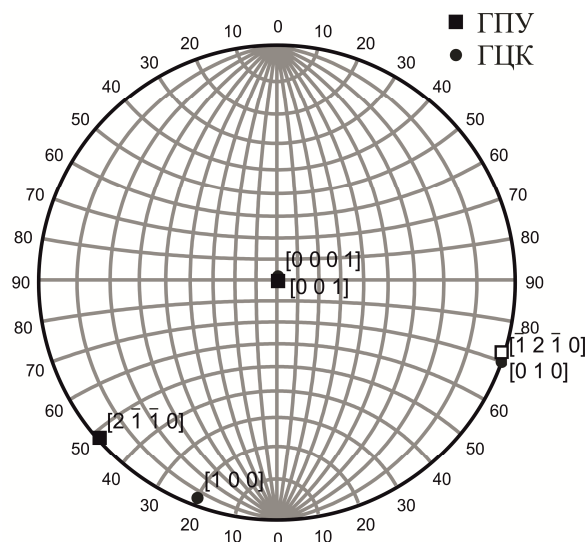


Рис. 4. Стереографические проекции основных направлений для ГЦК и ГПУ фаз

Взаимные сдвиги базисных плоскостей сводятся к поочередному смещению каждой атомной плоскости (001) в направлениях  $[100]$  и  $[\bar{1}00]$  на величину  $a_{ГПУ} / (2\sqrt{3}) \approx 0.74$ . В результате чередование координатных атомных плоскостей  $ABAB...$  исходной ГЦК-структуры сменяется чередованием базисных плоскостей  $A'B'A'B'....$  гексагонального кристалла. При этом атомы каждого слоя оказываются в позициях треугольных «лунок» соседних слоев.

Отметим, что взаимное смещение атомных плоскостей не сопровождается макроскопической деформацией, поэтому вклад в деформацию растяжения обеспечивает только деформация Бейна.

Таким образом, при одноосном растяжении нитевидного нанокристалла меди ориентации  $[001]$  пластическая деформация происходит не путем зарождения и перемещения дислокаций, а вследствие термоупругого мартенситного превращения кристалла ГЦК в ГПУ путем движения когерентной границы раздела в направлении исходной фазы.

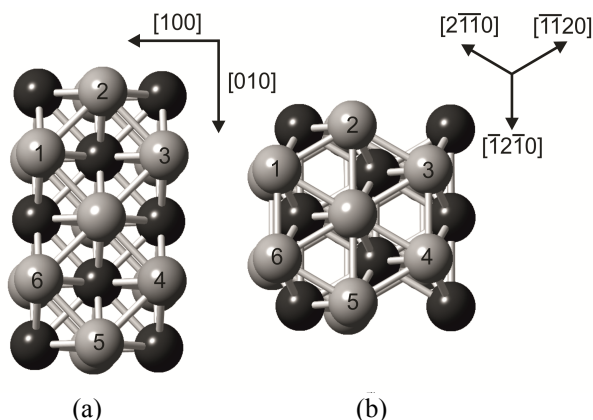


Рис 5. Фрагмент модели в исходной ГЦК-фазе (a) и после перестройки в ГПУ-фазу (b)

На стадии III ( $\varepsilon = 0.148-0.184$ ) происходит упругая деформация кристалла ГПУ-меди, деформационная кривая линейно возрастает. На стадии IV образуется шейка, происходит утонение образца и при  $\varepsilon = 0.311$  он разрушается. Деформация на этой стадии носит локальный характер. Методом анализа общих ближайших соседей было установлено, что в области шейки вновь появляется ГЦК структура, которая сохраняется вплоть до разрушения.

## Заключение

В отличие от массивных монокристаллов ориентации [001], пластическая деформация которых в условиях одноосного растяжения происходит за счет движения дислокаций, одноосное растяжение нанокристаллов меди той же ориентации сопровождается бездиффузионным фазовым превращением мартенситного типа: плоскость (001) исходной ГЦК фазы переходит в базисную плоскость (0001) ГПУ фазы. Перестройка решетки включает два этапа: деформацию Бейна и смещения базисных плоскостей в направлении [100]. Наблюдаемые особенности пластического формоизменения нанокристаллов являются проявлением размерного эффекта.

## Список литературы

- Губкин С. И. Пластическая деформация металлов. — М.: Металлургиздат, 1961. — Т. 2. — 417 с.
- Евтеев А. В., Косилов А. Т., Куликов Е. В., Левченко Е. В. Фазовые превращения при высокоскоростной деформации нанокристаллов ОЦК-железа ориентации [001] при различных температурах // Вестник ВГТУ. — 2006. — Т. 2, Вып. 11. — С. 15–19.
- Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. — М.: Мир, 1974. — 504 с.
- Коноваленко И. С., Крыжевнич Д. С., Зольников К. П., Псахье С. Г. Атомные механизмы локальных структурных перестроек при деформировании кристаллита титана // Письма в ЖТФ. — 2011. — Т. 37, Вып. 20. — С. 9–15.
- Лагунов В. А., Синани А. Б. Компьютерное моделирование деформирования и разрушения кристаллов // ФТТ. — 2001. — Т. 43, Вып. 4. — С. 644–650.
- Лобастов А. И., Шудегов В. Е., Чудинов В. Г. Пластическая деформация монокристаллов алюминия в компьютерном эксперименте // ЖТФ. — 2000. — Т. 70, Вып. 4. — С. 123–127.
- Норман Г. Э., Стегайлов В. В., Янилкин А. В. Моделирование высокоскоростного растяжения кристаллического железа методом молекулярной динамики // Теплофизика высоких температур. — 2007. — Т. 45, Вып. 2. — С. 193–202.
- Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and other Defects in Metals // Phys. Rev. B: Solid State. — 1984. — Vol. 29, No 12. — P. 6443–6453.
- Daw M. S., Baskes M. I. Semiempirical Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals // Phys. Rev. Lett. — 1983. — Vol. 50, No 17. — P. 1285–1288.
- Faken D., Jonsson H. Systematic analysis of local atomic structure combined with 3D computer graphics // Computational Materials Science. — 1994. — Vol. 2. — P. 279–286.
- Junge T., Molinari G.-F. Molecular dynamics nano-scratching of aluminium: a novel quantitative energy-based analysis method // Procedia IUTAM. — 2012. — Vol. 3. — P. 192–204.
- Kadau K., Germann T. C., Lomdahl P. S., Kadau D., Entel P., Kreth M., Westerhoff F., Wolf D. E. Molecular-Dynamics Study of Mechanical Deformation in Nano-Crystalline Aluminum // Metallurgical and materials transactions A. — 2004. — Vol. 35A. — P. 2719–2723.
- Verlet L. Computer Experiments on Classical Fluids // PhysRev. — 1967. — Vol. 159. — P. 98–103.
- Zhao K. J., Chen C. Q., Shen Y. P., Lu T. J. Molecular dynamics study on the nano-void growth in face-centered cubic single crystal copper // Computational Materials Science. — 2009. — Vol. 46. — P. 749–754.