

# Молекулярно-динамическое исследование влияния интерфейсных границ и температуры на зарождение и развитие локальных структурно-фазовых перестроек в титане при механическом нагружении \*

ИВ.С. КОНОВАЛЕНКО  
e-mail: ivkon@ispms.tsc.ru

К.П. ЗОЛЬНИКОВ  
Д.С. КРЫЖЕВИЧ  
С.Г. ПСАХЬЕ

*Учреждение Российской академии наук  
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН*

Проведено молекулярно-динамическое моделирование зарождения и развития пластической деформации в кристаллите титана в ГПУ фазе при одноосном растяжении. Исследовано влияние интенсивности нагружения на генерацию локальных структурно-фазовых перестроек в кристаллите. Показано, что их генерация ведет к скачкообразному уменьшению потенциальной энергии моделируемого образца. Установлено, что с ростом интенсивности нагружения увеличивается пороговое значение деформации, при котором начинают зарождаться локальные структурно-фазовые перестройки. Изучена роль интерфейсных границ, фазового состава и температуры на особенности зарождения и развития пластической деформации в нагружаемом кристаллите. Исследовано изменение атомной структуры в области возникновения локальных структурно-фазовых перестроек. Показано, что изменения локальной структуры атомов, вблизи которых генерируются структурно-фазовые перестройки, определяются атомными переходами между первой и второй координационными сферами.

Согласно современным научным представлениям пластическая деформация в материалах представляет собой сложный многоуровневый процесс. В нагружаемом материале она связана с зарождением и развитием дефектов структуры, характерных для каждого из его масштабных уровней [1]. На мезо- и более высоких масштабных уровнях механизмы развития и эволюции дефектной подсистемы нагружаемого материала достаточно хорошо изучены [1, 2]. Отметим, что зарождение процессов пластичности начинается на микромасштабном (атомном) уровне, и в последующем дефектная структура развивается на более высоких масштабных уровнях. Несмотря на значительные успехи в изучении структурного отклика различных материалов при механическом воздействии [1, 2], вопросы зарождения пластической деформации на атомном уровне все еще недостаточно хорошо изучены. При этом одной из фундаментальных проблем физики твердого тела и современного материаловедения является исследование возможных механизмов формирования локальных структурных искажений и трансформаций атомной структуры. Экспериментальное изучение встречает определенные трудности,

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ (№ 09-08-00498-а).

связанные с малостью характерных времен атомных перестроек структуры нагружаемых материалов, а также невозможностью их непосредственного наблюдения в процессе деформирования. Эффективным подходом к решению данной проблемы является компьютерное моделирование. Следует отметить, что поведение металлов с ГЦК и ОЦК структурой на атомном уровне на основе компьютерного моделирования изучено достаточно хорошо, в то время как работ по исследованию данных вопросов для ГПУ металлов существенно меньше [3-5]. В связи с вышесказанным, целью настоящей работы является исследование атомных механизмов зарождения и развития структурно-фазовых перестроек в металлическом кристаллите с ГПУ структурой при механическом нагружении на основе компьютерного моделирования. В качестве объекта исследования выбран кристаллит титана, поскольку данный металл широко используется на практике и его изучение важно как с научной, так и с практической точек зрения.

Решение поставленной задачи выполнялись на основе метода молекулярной динамики с многочастичными потенциалами межатомного взаимодействия, полученными в рамках метода погруженного атома [6]. Такой подход учитывает дискретность структуры моделируемого материала и достаточно точно описывает поведение его атомной системы [3-5]. Используемые потенциалы позволяют с высокой степенью точности описывать упругие, энергетические и структурные свойства моделируемых кристаллитов, адекватно учитывать их свойства вблизи границ раздела [3-5].

Моделируемый кристаллит титана в ГПУ фазе представлял собой прямоугольный параллелепипед. Образец состоял из 40 000 атомов. Равновесные значения параметров решетки составляли  $a = 2.97$  и  $c = 4.68$  Å. Кинетическая температура изучаемого образца до нагружения составляла  $T = 100$  К.

На двух противоположных гранях кристаллита, нормальных к плоскости границы зерна, задавались жесткие граничные условия (направление оси  $X$ ) (Рис. 1). Грани образца в направлении оси  $Y$  представляли собой свободные поверхности, а в направлении оси  $Z$  – задавались периодические граничные условия. Нагружение (растяжение) кристаллита задавалось вдоль направления действия жестких граничных условий. Для этого нескольким атомным плоскостям, лежащим на противоположных гранях кристаллита, задавались постоянные атомные скорости. На данных гранях (они являются аналогом захватов) модули атомных скоростей были равны, а направления противоположны (Рис. 1).

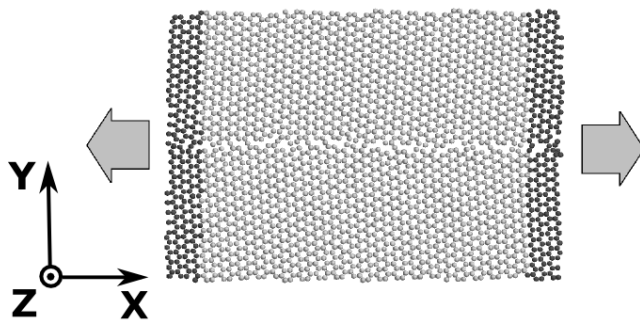


Рис. 1. Проекция структуры и схема нагружения моделируемого кристаллита. Черным цветом отмечены атомы, которым задавались постоянные скорости в направлении стрелок

Результаты расчетов показали, что при растяжении кристаллита с идеальной структурой его потенциальная энергия монотонно увеличивается с ростом деформации и при ее определенном пороговом значении начинает спадать. Наличие данного максимума является характерным для различных значений интенсивности нагружения кристаллита (Рис. 2, а) и свидетельствует о прохождении в нем некоторых структурных перестроек. Большинство материалов содержат структурные неоднородности, и их необходимо учитывать при изучении зарождения и развития в них пластической деформации. В связи с этим аналогичные исследования (Рис. 2, б) были проведены для кристаллита, содержащего симметричную наклонную межзеренную границу, с углом разориентации зерен  $\alpha = 53^\circ$ , сформированную по алгоритму [7]. Сравнение результатов расчетов для обоих образцов показывает, что пороговое значение деформации, при котором их потенциальная энергия достигает максимума, при одинаковых интенсивностях нагружения больше для кристаллита с идеальной структурой (Рис. 2, а, б). Увеличение скорости нагружения приводит к росту этого значения деформации. Это объясняется тем, что релаксационные процессы в материале «не успевают» за навязанными ему структурными перестройками.

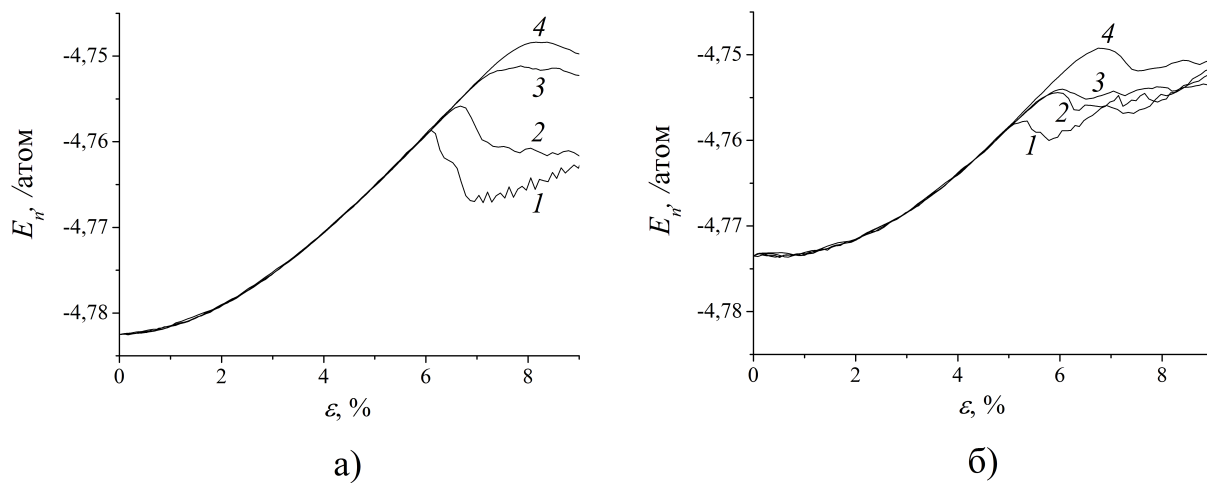


Рис. 2. Зависимости изменения потенциальной энергии кристаллита ( $E_n$ ) с идеальной структурой (а) и содержащего границу зерна (б) от деформации ( $\epsilon$ ) для различных значений скорости растяжения ( $V$ ): 1 – 5 м/с; 2 – 25 м/с; 3 – 45 м/с; 4 – 65 м/с

Более детальное изучение зарождения и развития пластической деформации в нагружаемых кристаллитах проводилось на основе анализа изменения доли их атомов, характеризующихся относительным сдвигом их ближайшего окружения. Величина сдвига оценивалась вектором смещений  $\mathbf{P}_i$ , который рассчитывался по формуле:

$$\mathbf{P}_i = 1/N_s \sum_{i \neq j}^{N_s} (\mathbf{r}^{ij} - \mathbf{r}_0^{ij}) / |\mathbf{r}_0^{ij}|$$

где  $j$  – ближайший сосед атома  $i$ ;  $N_s$  – число ближайших соседей;  $\mathbf{r}^{ij}$  и  $\mathbf{r}_0^{ij}$  – радиус вектор  $j$ -ого относительно  $i$ -ого в текущем и исходном положениях, соответственно.

Зависимости изменения доли атомов  $\nu$  с различными значениями вектора смещений в нагружаемых кристаллитах и их потенциальной энергии от деформации приведены на (Рис. 3, а, б). Видно, что с увеличением значения вектора  $\mathbf{P}_i$  доля  $\nu$  атомов, характеризующихся такой величиной смещений, уменьшается. В процессе деформирования кристаллитов количество атомов с различными величинами локальных смещений воз-

растет (Рис. 3, а, б кривые 1-3). Начиная с некоторого значения деформации, кривые 1-3 начинают плавно расти, что хорошо коррелирует с характером поведения зависимости потенциальной энергии кристаллитов от деформации (Рис. 3, а, б кривая 4). Отмечено, что количество атомов кристаллитов со значениями вектора смещений  $|\mathbf{P}_i| < 0.08$  увеличивается плавно аналогично монотонному росту кривой зависимости потенциальной энергии от деформации (Рис. 3, а, б кривые 1,2). При больших значениях вектора смещений ( $|\mathbf{P}_i| > 0.15$ ) (Рис. 3, а, б кривая 3) наблюдается лавинообразное увеличение числа таких атомов при значении деформации кристаллитов, соответствующем области спада кривой потенциальной энергии. Это позволяет говорить о непосредственном участии атомов с данным значением вектора смещений в прохождении структурных перестроек в нагружаемых кристаллитах.

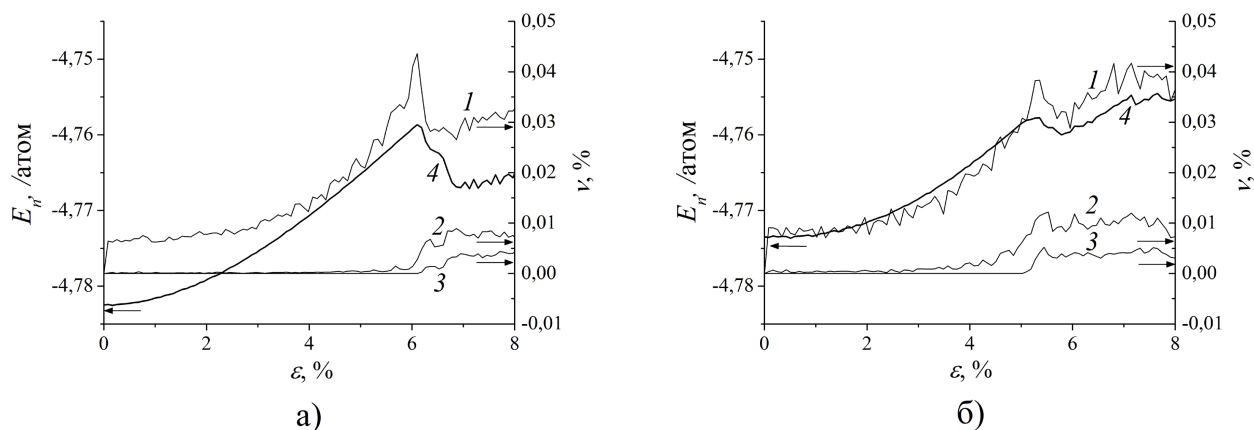


Рис. 3. Зависимости изменения доли атомов ( $\nu$ ) со значением вектора смещений ( $|\mathbf{P}_i|$ ): 1 – 0.05; 2 – 0.07; 3 – 0.2 и потенциальной энергии ( $E_{\text{п}}$ ) – 4 от деформации ( $\epsilon$ ) для кристаллита титана с идеальной структурой (а) и содержащего границу зерна (б). Скорость нагружения  $V = 5$  м/с

Анализ структуры в процессе растяжения показывает, что развитие пластической деформации в кристаллите приводит к формированию полос сдвига (Рис. 4, а). Атомы в полосах сдвига характеризуются повышенными значениями вектора смещений (более 0.15). Результаты расчетов показали, что изменение вектора смещения у таких атомов происходит скачкообразно (Рис. 4, б кривая 2) и сопровождается уменьшением потенциальной энергии кристаллита (Рис. 4, б кривая 1). Исследование поведения локальной структуры атомов, вблизи которых генерируются структурно-фазовые перестройки, проводилось на основе анализа изменения положения ближайших соседей. Результаты расчетов показали, что скачкообразное изменение вектора смещения соответствует переходу двух атомов со второй координационной сферы на первую, и двух атомов с первой координационной сферы – на вторую. Анализ функций радиального распределения показывает, что после скачкообразного изменения вектора смещения пик, соответствующий первой координационной сфере, становится более отчетливым, что может быть связано с упорядочением локальной атомной структуры.

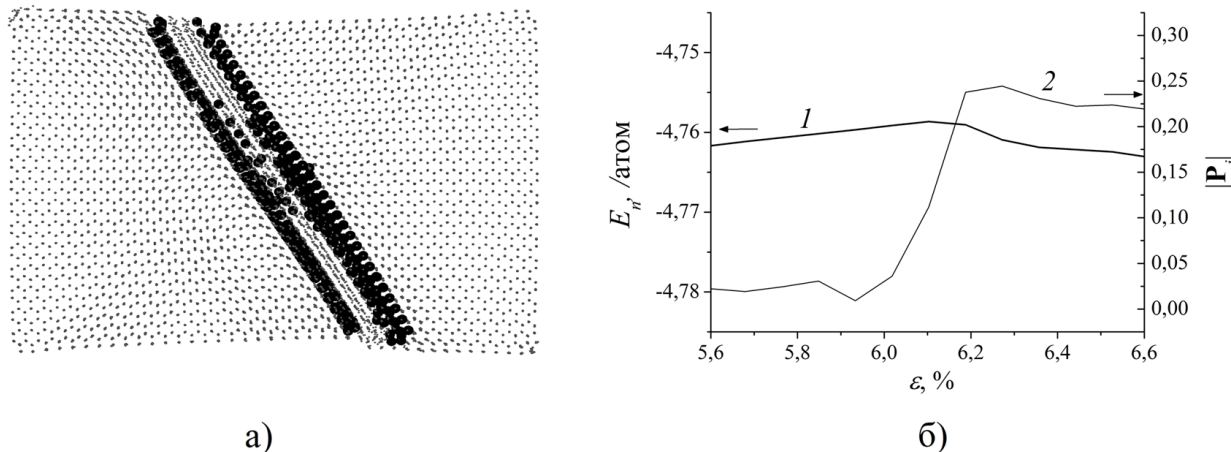


Рис. 4. Структура кристаллита при растяжении 6,27 %. Атомы со значением вектора смещений  $|\mathbf{P}_i| > 0.2$  показаны более крупными сферами (а). Зависимости изменения потенциальной энергии кристаллита ( $E_p$ ) с идеальной структурой – 1 и значения вектора смещений ( $|\mathbf{P}_i|$ ) атома, расположенного в области формирования локальных структурных изменений, от деформации ( $\varepsilon$ ) – 2 (б). Скорость растяжения  $V = 5$  м/с

Таким образом, проведенные расчеты показали, что зарождение пластической деформации в кристаллите титана сопровождается лавинообразной генерацией локальных структурных изменений при достижении пороговой величины деформации. При этом, генерация локальных атомных изменений начинается в области межзеренной границы. Наличие в кристаллите межзеренной границы понижает пороговое значение деформации по сравнению с его значением для кристаллита с идеальной структурой.

Показано, что локальные структурные изменения определяются перестройками на первой и второй координационных сферах. С ростом интенсивности нагружения увеличивается пороговая величина деформации кристаллита и доля его атомов, в окружении которых происходят локальные атомные смещения. Это обусловлено «инерционностью» релаксационных процессов в материале при навязанном механическом нагружении.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ (№ 09-08-00498-а).

## Список литературы

- [1] В.Е. Панин, Ю.В. Гриняев, Л.Б. Зуев, В.Е. Егорушкин и др. / Структурные уровни пластической деформации и разрушения. Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1990.
- [2] В.Е. Панин, П.В. Макаров, С.Г. Псахье и др. / Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов в 2т. Новосибирск: Наука, Сибирская издательская фирма РАН, 1995.
- [3] SARAEV D., MILLER R.E. Atomic-scale simulations of nanoindentation-induced plasticity in copper crystals with nanometer-sized nickel coatings // *Acta Mater.* 2006. Vol. 54. P. 33–45.
- [4] SHIMOMURA Y., KIRITANI M., MUKOUDA I. Computer simulation study of the atomistic mechanism of deformation and fracture initiation in thin fcc metal films // *Mater. Sci. and Eng. A.* 2003. V 350. P. 238–244.
- [5] PSAKHIE S.G., ZOLNIKOV K.P., KRYZHEVICH D.S. Elementary atomistic mechanism of crystal plasticity // *Phys. Let. A.* 2007. V. 367. P. 250–253.

- [6] ACKLAND G.J. Theoretical study of titanium surfaces and defects with a new many-body potential // Phil. Mag. A. 1992. Vol. 66. P. 917–932.
- [7] SUZUKI A., MISHIN Y. Atomistic modeling of point defects and diffusion in copper grain boundaries // Interf. Sci. 2003. V. 11. P. 131–148.