

## О термофлуктуационном формировании локальных структурных изменений в кристалле в условиях динамического нагружения

С.Г. Псахье, К.П. Зольников, Д.С. Крыжевич, А.Н. Тюменцев

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, 634021, Россия

Изучен отклик материала с исходно идеальной кристаллической решеткой в условиях динамического нагружения в широком температурном интервале. Расчеты проводились в рамках метода молекулярной динамики с применением многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия, полученных на основе метода погруженного атома. Показано, что тепловые флуктуации могут являться причиной генерации областей с локальным изменением структуры. Анализ результатов показал, что существует некоторое пороговое значение деформации, при котором происходит практически скачкообразный рост числа областей с локальными структурными изменениями. Проводится аналогия прекурсорных и сильновозбужденных состояний.

## On the generation of local structural changes in a crystal induced by thermal fluctuations under dynamic loading

S.G. Psakhie, K.P. Zolnikov, D.S. Kryzhevich, and A.N. Tyumentsev

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, 634021, Russia

Consideration is given to the response of a material with an initially perfect lattice under dynamic loading in a wide temperature range. The calculations are performed in the framework of a molecular dynamics method using many-body potentials of interatomic interaction obtained on the basis of the embedded atom method. It is demonstrated that thermal fluctuations can be a reason for the generation of zones with local structural changes. Analysis of the results has shown that there is a threshold strain value at which the number of zones with local structural changes grow almost abruptly. We draw the analogy between precursory and highly excited states.

### 1. Введение

Изучение процессов формирования структурных дефектов различного типа и природы, начиная от точечных и вплоть до трехмерных, является важным для понимания закономерностей зарождения и развития пластической деформации материалов. Особенно это актуально для понимания поведения материалов в условиях динамического нагружения, поскольку при этом процесс деформирования сопровождается формированием так называемых динамических дефектов [1–4]. В этой связи, безусловно, одной из фундаментальных проблем физики твердого тела и материаловедения является исследование возможных термофлуктуационных механизмов формирования локальных структурных искажений и трансформаций атомной структуры, которые могут быть отнесены к так называемым прекур-

сорным состояниям [5]. Необходимо отметить, что уже более 20 лет назад в работах академика В.Е. Панина [6, 7] была предложена подобная концепция, в рамках которой зарождению дефектов предшествует формирование так называемого сильновозбужденного состояния кристалла. К сожалению, эта концепция не получила должного развития. В значительной степени это связано с тем, что экспериментальное исследование процессов зарождения дефектов структуры различного типа на атомном уровне является достаточно сложной проблемой, поскольку ее решение связано со значительными трудностями, обусловленными необходимостью высокого временного ( $10^{-14}$  с) и пространственного ( $10^{-9}$  м) разрешения. В этой ситуации компьютерное моделирование процесса механического нагружения на основе молекулярной динамики является эффективным спосо-

бом исследования как механизмов генерации дефектов структуры, так и динамики их развития. Так, в работе [8] впервые на основе прямого молекулярно-динамического моделирования показана принципиальная возможность термофлуктуационного механизма генерации прекурсорных (сильновозбужденных) состояний при динамическом воздействии и последующего зарождения дефектов структуры. Но следует отметить, что при этом осталось не изученным влияние на эти процессы условий нагружения.

В связи этим в настоящей работе ставилась задача провести исследования атомных механизмов, ответственных за термофлуктуационное зарождение пластической деформации в материале при динамическом воздействии. Расчеты проводились в широком температурном интервале (100–700 К) и для различных кристаллографических направлений, вдоль которых прикладывалась нагрузка. Отметим, что для простоты интерпретации результатов моделирование деформации целесообразно проводить на основе кристаллита с идеальной структурой, поскольку при этом следует ожидать, что ответственными за зарождение локальных структурных изменений могут быть, прежде всего, тепловые флуктуации.

Поставленные в работе задачи решались на основе молекулярно-динамического моделирования с использованием потенциалов межатомного взаимодействия, построенных в рамках метода погруженного атома. Как показано в работах [9–11], используемые потенциалы позволяют с высокой точностью описывать структурные, механические и энергетические свойства в объеме материала, в приповерхностных областях и непосредственно на свободной поверхности.

## 2. Результаты расчетов и их обсуждение

Моделируемый кристаллит меди имел форму параллелепипеда, для исключения влияния поверхностных эффектов использовались периодические граничные ус-

ловия во всех направлениях. Кристаллит был ориентирован следующим образом: ось  $X$  была направлена вдоль кристаллографического направления  $[110]$ ; ось  $Y$  — вдоль  $[1\bar{1}0]$ ; а ось  $Z$  — вдоль  $[001]$ . Известно, что при равномерном сжатии ГЦК-кристалла на величину  $\sim 20\%$  вдоль направления  $[001]$  и одновременном растяжении на величину  $\sim 12\%$  вдоль направлений  $[110]$  и  $[1\bar{1}0]$  исходная структура трансформируется в ОЦК-структуру. При этом изменение потенциальной энергии, приходящейся на один атом, составляет сотые доли электронвольта.

Анализ структуры деформированного кристалла, а именно, идентификация локальных структурных искажений, проводился на основе алгоритма, предложенного в [12]. Согласно этому алгоритму каждой паре атомов сопоставляется набор из четырех чисел. Первое число характеризует «отношения» атомов. Оно равно 1, если эти атомы являются соседями, и 2 — в противном случае. Второе число — количество общих соседей у данной пары атомов. Третье число — количество связей между общими соседями. Четвертое число — количество связей в самой длинной непрерывной цепочке, которая проходит через соседей данной пары. Для идеальной ГЦК-структуры каждый атом характеризуется 12-ю наборами чисел  $\{1/4/2/1\}$ , для ГПУ-структуры 6-ю наборами чисел  $\{1/4/2/1\}$  и 6-ю наборами  $\{1/4/2/2\}$ , для ОЦК-структуры 8-ю наборами  $\{1/0/0/0\}$ .

Для изучения влияния температурного фактора на «структурный отклик» моделируемого кристаллита расчеты проводились при: 100, 300, 500, 700 К. На рис. 1 приведены графики зависимости потенциальной энергии, приходящейся на один атом, для различных температур при скорости сжатия 50 м/с.

Из рис. 1, *a* хорошо видно, что при данной схеме деформирования кристалла переход ГЦК-структуры в ОЦК не связан с преодолением энергетических барьеров. Влияние температуры хорошо видно на рис. 1, *b*, при этом ход кривых можно условно разбить на два

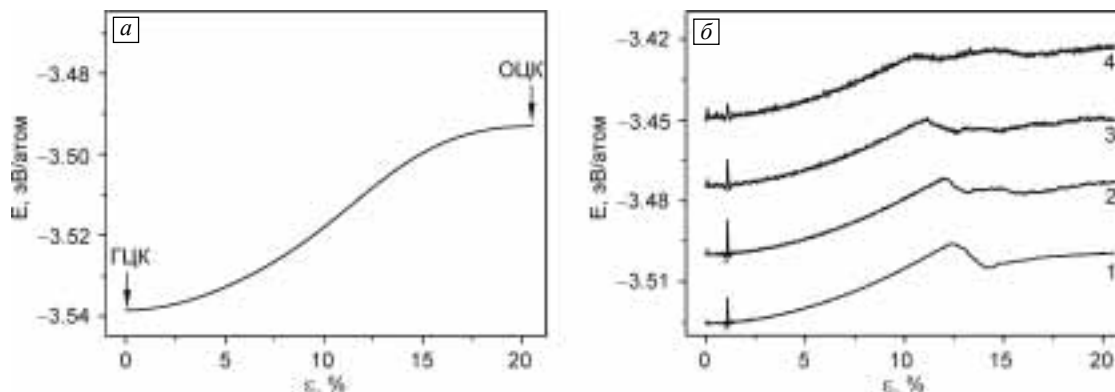


Рис. 1. Зависимость потенциальной энергии, приходящейся на атом, от степени деформации для скорости сжатия вдоль оси  $Z$  50 м/с: *a* — для  $T = 0$  К; *b* — для температур 100 (1); 300 (2); 500 (3); 700 К (4)

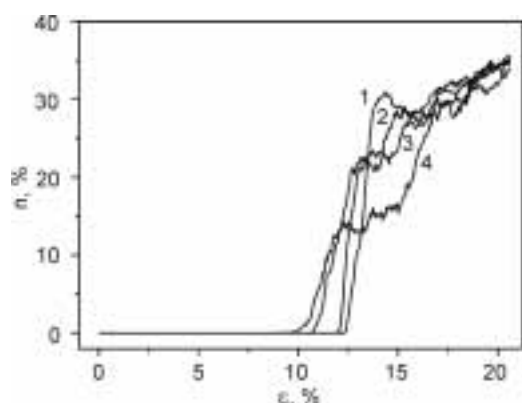


Рис. 2. Зависимость доли ГПУ-атомов  $n$  от степени деформации  $\varepsilon$  для температур: 100 (1); 300 (2); 500 (3); 700 К (4)

участка: первый из них характеризуется нарастанием потенциальной энергии в моделируемом кристаллите, а второй начинается со спада кривой (примерно с 12 %) с последующим плавным ростом. Отметим, что при всех температурах имеют место характерные пики на кривых потенциальной энергии при малых степенях деформации (1.5–2 %). Проведенный в работе анализ показал, что данные пики связаны с тем, что скорость аккомодационных процессов в кристаллите на данном этапе деформирования значительно ниже скорости навязанной деформации. Расчеты показали, что данные пики на кривых потенциальной энергии полностью исчезают, если нагружение моделируемого образца на каждом шаге чередовать с его релаксацией.

Спад на кривых потенциальной энергии (при деформации 12 %) связан с началом генерации областей с локальными структурными изменениями, что хорошо видно на рис. 2, на котором показано интегральное влияние температуры на зарождение и развитие структурных искажений при высокоскоростной деформации образца. Анализ структуры этих областей на основе вышеописанной методики показал наличие структурных искажений — прекурсорных (сильновозбужденных) состояний. Симметрия этих локальных искажений соответствует структуре, свойственной ГПУ-решетке. При этом, как хорошо видно из рис. 2, повышение температуры моделируемого кристалла приводит к тому, что генерация таких областей начинается при более низких величинах деформации. Наблюдаемый «структурный отклик» кристалла при высокоскоростной деформации и характер его изменения в зависимости от температуры указывают на то, что генерация областей с локальными структурными изменениями носит термофлуктуационный характер. Отметим, что доля атомов, принадлежащих областям с локальными структурными изменениями, по отношению к их общему числу в образце при низких температурах выше, что связано с более высоким уровнем упругой энергии, приобретенной при де-

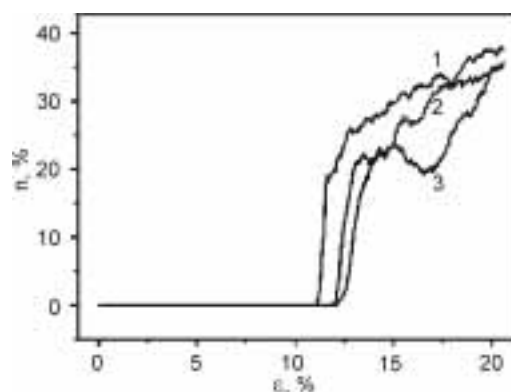


Рис. 3. Изменение доли атомов, принадлежащих областям с локальными изменениями структуры, в зависимости от степени деформации вдоль оси  $Z$  при различных скоростях сжатия: 27 (1); 55 (2); 110 м/с (3)

формировании образца, до начала генерации прекурсорных состояний.

Для исследования влияния скорости нагружения на генерацию структурных искажений проводилось моделирование при температуре 300 К для различных скоростей сжатия вдоль оси  $Z$ . Результаты расчетов зависимости доли атомов, принадлежащих областям со структурой, свойственной ГПУ-решетке, приведены на рис. 3. Ход кривых явно показывает, что при относительно низких скоростях нагружения генерация структурных искажений при достижении критического значения деформации, происходит практически лавинообразно. Этот процесс интенсивно развивается вплоть до достижения концентрации структурных искажений уровня  $\sim 20\%$ , после чего режим возрастания доли атомов, находящихся в прекурсорных (сильновозбужденных) состояниях, резко меняется.

Анализ данных компьютерных экспериментов показал, что это связано, прежде всего, с тем, что упругие поля областей локальных структурных искажений начинают «чувствовать» друг друга (аналог порога перколя-

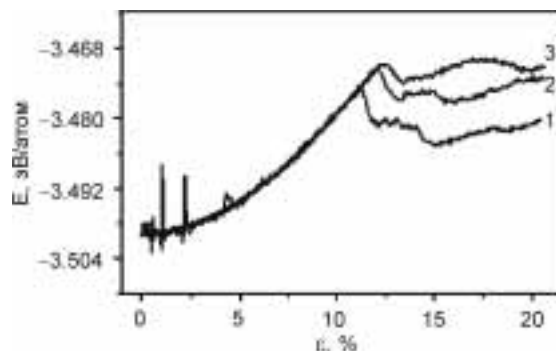


Рис. 4. Изменение потенциальной энергии, приходящейся на один атом, в образце в зависимости от степени деформации вдоль оси  $Z$  при различных скоростях сжатия: 27 (1); 55 (2); 110 м/с (3)

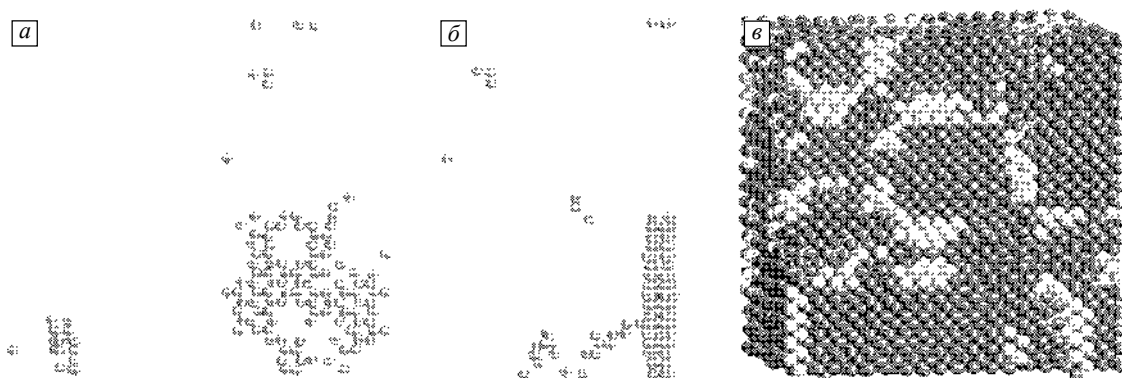


Рис. 5. Атомная структура под различными углами для области с локальными структурными изменениями при сжатии на 11.3 % вдоль оси  $Z$  ( $a$ ,  $b$ ). Общий вид моделируемого кристаллита при сжатии на 18 % вдоль оси  $Z$  ( $c$ ), где светлые шары обозначают принадлежность атомов к областям с локальными структурными изменениями

ции), в результате чего начинаются процессы их роста, слияния, распада и изменения внутренней структуры. Характер изменения потенциальной энергии, приходящейся на один атом, в образце в зависимости от степени деформации вдоль оси  $Z$ , показанный на рис. 4 для различных скоростей сжатия, подтверждает релаксационную природу локальных структурных искажений, поскольку с понижением скорости нагружения уменьшаются не только их концентрация, но и порог начала их формирования.

Отметим, что при дальнейшем увеличении скорости деформирования релаксационные процессы не успевают обеспечивать генерацию локальных структурных изменений, что, в конечном счете, существенно меняет характер изменения их концентрации. В частности, начало генерации существенно смещается в сторону больших значений деформации и начинается при больших величинах потенциальной энергии. Следствием этого является более плавное нарастание числа атомов, принадлежащих областям со структурой, свойственной ГПУ-решетке, и их максимальная доля уменьшается при увеличении скорости деформирования моделируемого образца.

Исследование структуры кристаллита в процессе деформации показывает, что генерация областей с локальными структурными изменениями начинается там, где в результате тепловых флуктуаций возникло локальное увеличение объема. Характерно, что сам процесс формирования данных областей сопровождается скачкообразным уменьшением локального объема на 5–6 %, причем атомы, вовлеченные в процесс формирования областей со структурой, свойственной ГПУ-решетке, смещаются на большие расстояния, чем другие атомы моделируемого образца.

На рис. 5,  $a$  и  $b$  в качестве примера показаны (под разными углами зрения) атомы, принадлежащие данным областям при деформации кристалла на 11.3 %.

Анализ взаимного расположения атомов показал, что внутренняя структура данных областей соответствует структуре дефекта упаковки. Общий (трехмерный) вид кристаллита для более поздней деформации (18 %) показан на рис. 5,  $c$ . Видно, что данные области ориентированы вдоль определенных кристаллографических направлений.

Следует отметить, что в процессе деформирования наряду с областями локальных структурных изменений, которые могут быть соотнесены с ГПУ-структурой, возникают зоны искажений кристаллической решетки, которые не могут быть ассоциированы ни с ГПУ-, ни с ГЦК-структурами. Это соответствует представлениям о том, что сильновозбужденные состояния в кристалле могут реализоваться как своеобразная смесь структур [6, 7]. Исследования показали, что их возникновение носит флуктуационный характер. Часть из них впоследствии трансформируется в структуры с более стабильной ГПУ-симметрией, что проявляется в пилообразной форме кривых на рис. 1 и 3.

Отметим, что существуют и другие геометрические пути нагружения, при которых ГЦК-структура может трансформироваться в ОЦК-решетку. Хорошо известен путь перестройки решетки по схеме Бейна, который заключается в следующем [13]: первоначальная ГЦК-решетка ( $c/a = 1$ ) сжимается вдоль направления  $[100]$  и одновременно растягивается на одинаковую величину в направлениях  $[010]$  и  $[001]$  так, что первоначальный объем, приходящийся на один атом, остается постоянной величиной. При отношении  $c/a = 1/\sqrt{2}$  решетка трансформируется в ОЦК.

Расчеты, проведенные в настоящей работе, показали, что изменение потенциальной энергии при деформациях вдоль направлений, соответствующих схеме Бейна, качественно аналогично рассмотренному выше случаю (рис. 1), так как переход из ГЦК в ОЦК в обоих случаях не связан с преодолением энергетического

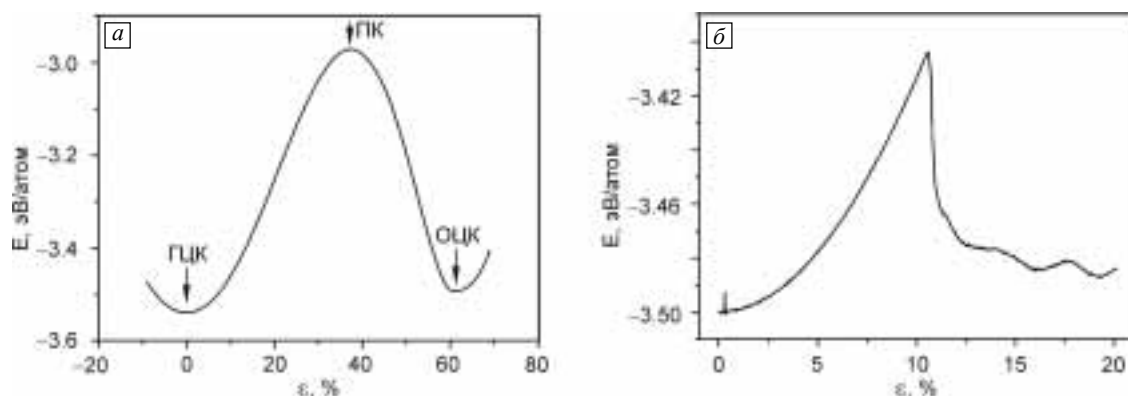


Рис. 6. Изменение потенциальной энергии, приходящейся на один атом, при деформации вдоль тригонального пути для: 0 (а); 300 К (б)

барьера. Поэтому можно было ожидать, что и отклик образцов будет подобным. Это подтвердили не только полученные кривые зависимости доли областей локальных структурных изменений, но также и общий ход зависимостей потенциальной энергии от степени деформации.

Качественно отличным является тригональный деформационный путь перевода ГЦК-решетки в ОЦК, который моделируется приложением сжимающего напряжения вдоль кристаллографического направления  $[111]$  (ось  $X$ ) и растягивающих напряжений вдоль  $[\bar{1}21]$  (ось  $Y$ ) и  $[\bar{1}01]$  (ось  $Z$ ) таким образом, чтобы сохранялась ось третьего порядка вдоль направления  $[111]$  и сохранялся постоянным объем [13]. В этом случае для перехода из ГЦК-решетки в ОЦК требуется преодолеть достаточно высокий потенциальный барьер (порядка 0.5 эВ) (рис. 6, а), тогда как при деформации в рассмотренных выше направлениях энергетический барьер отсутствовал.

Для сравнения отклика образца при нагружении вдоль тригонального деформационного пути рассмотрим его поведение при сжатии на величину 20.6 %, как и в вышеописанных случаях. Расчет проведен для тем-

пературы 300 К, а скорость деформации составляла 15 м/с. Расчеты показывают, что изменение потенциальной энергии, приходящейся на один атом, составляет примерно 0.1 эВ (рис. 6, б). Изменение доли атомов, принадлежащих областям со структурой, свойственной ГПУ-решетке, в зависимости от деформации приведено на рис. 7.

Как и в вышеописанных случаях, зарождение областей с локальными структурными изменениями начинается при достижении деформации  $\sim 11.0\%$ . Затем следует скачкообразное уменьшение потенциальной энергии (рис. 6, б). Расчеты показали, что дальнейшее увеличение деформации приводит к тому, что размеры областей с локальным структурным изменением начинают быстро уменьшаться и, в конце концов, доля атомов, принадлежащих данным областям, составляет менее 1 %.

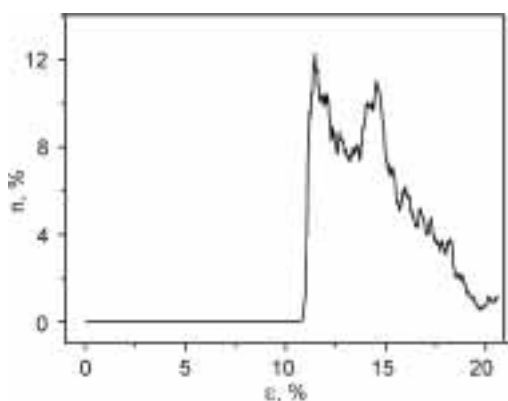


Рис. 7. Зависимость доли ГПУ-атомов в образце меди от степени деформации для 300 К

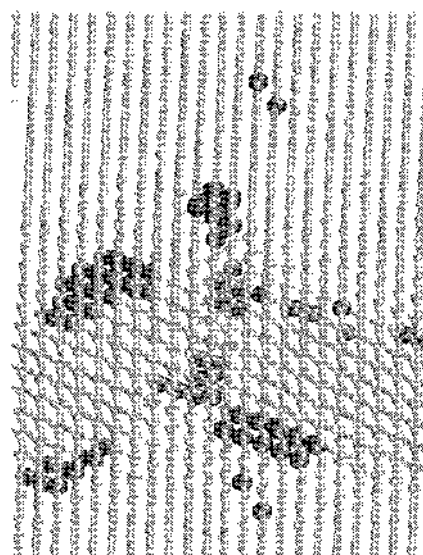


Рис. 8. Фрагментированная структура кристалла для тригонального пути деформирования при деформации  $\sim 20\%$ . Вид на структуру вдоль оси  $Z$ . Крупные темные кружки соответствуют областям со структурой, свойственной ГПУ-решетке

Этот эффект объясняется тем, что аккомодационные процессы в моделируемом кристалле направлены таким образом, что при степенях деформации, превышающих 15 %, области структурных искажений трансформируются в нанофрагменты (трехмерные дефекты), что в данном случае и является доминирующим фактором, вызывающим уменьшение потенциальной энергии (рис. 7). Пример фрагментированной структуры кристалла при  $\epsilon = 20\%$  приведен на рис. 8. Отметим, что приграничные области, разделяющие блоки с разориентированной исходной ГЦК-структурой, в значительной степени состоят из областей локальных структурных искажений.

### 3. Заключение

Таким образом, в настоящей работе впервые на основе молекулярно-динамического моделирования показана возможность термофлуктуационного механизма генерации прекурсорных (сильновозбужденных) состояний и зарождения дефектов структуры при динамическом нагружении в материалах с исходно идеальной кристаллической решеткой. Следует отметить, что существует некоторое пороговое значение деформации, при достижении которого происходит практически скачкообразный рост областей локальных структурных изменений. В рассмотренных случаях характер зарождения и развития дефектов структуры в значительной степени определяется температурой образца, скоростью деформирования кристалла и выбором кристаллографического направления деформирования исходного кристалла. При этом, хотя система нагружения была намеренно выбрана для направленного изменения симметрии, соответствующего переходу к ОЦК-решетке, структура данных областей соответствовала ГПУ-решетке. Такое поведение, очевидно, связано с относительно близкими значениями энергий ГЦК и ГПУ структурных состояний.

Свойства атомных конфигураций, соответствующих прекурсорным состояниям, во многом подобны свойствам, которые в работах В.Е. Панина ассоциировались с сильновозбужденными состояниями, в частности, для них характерным является пониженное сопротивление сдвигу вплоть до локальной потери сдвиговой устой-

чивости. Последнее делает перспективным исследование механизмов процесса пластической деформации на основе представлений о термофлуктуационном характере генерации локальных структурных искажений и их последующей эволюции.

### Литература

1. Дмитриев А.И., Псахье С.Г. Молекулярно-динамическое исследование зарождения процесса локализации деформации в поверхностных слоях материала на наномасштабном уровне // Письма в ЖТФ. – 2004. – Т. 30. – Вып. 14. – С. 8–12.
2. Дмитриев А.И. Молекулярно-динамическое исследование особенностей проявления согласованного коллективного движения атомов в нагруженном материале вблизи свободной поверхности // Физ. мехомех. – 2005. – Т. 8. – № 3. – С. 79–92.
3. Псахье С.Г., Уваров Т.Ю., Зольников К.П. О новом механизме генерации дефектов на границах раздела. Молекулярно-динамическое моделирование // Физ. мезомех. – 2000. – Т. 3. – № 3. – С. 69–71.
4. Псахье С.Г., Зольников К.П. О возможности вихревого механизма перемещения границ зерен при высокоскоростном сдвиговом нагружении // ФГВ. – 1998. – Т. 34. – № 3. – С. 126–128.
5. Полухин В.А. Моделирование наноструктуры и прекурсорных состояний. – Екатеринбург: УрО РАН, 2004. – 207 с.
6. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Хон Ю.А., Елсукова Т.Ф. Атомвакансионные состояния в кристаллах // Изв. вузов. Физика. – 1982. – № 12. – С. 5–28.
7. Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Егорушкин В.Е., Бухбиндер И.Л., Кульков С.Н. Спектр возбужденных состояний и вихревое механическое поле в деформируемом кристалле // Изв. вузов. Физика. – 1987. – Т. 30. – № 1. – С. 34–51.
8. Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Lipnitskii A.G. On structural defect generation induced by thermal fluctuations in materials with a perfect lattice under dynamic loading // Physics Letters A. (*in print*).
9. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. – 1984. – V. B29. – No. 12. – P. 6443–6453.
10. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. – 1986. – V. B33. – No. 12. – P. 7983–7991.
11. Псахье С.Г., Зольников К.П., Уваров Т.Ю. О новом подходе к нанесению многослойных сверхтонких покрытий. Эффекты перемешивания // ФГВ. – 2000. – Т. 36. – № 4. – С. 137–139.
12. Van Swygenhoven H., Farkas D., Caro A. Grain-boundary structures in polycrystalline metals at the nanoscale // Phys. Rev. – 2000. – V. B62. – No. 2. – P. 831–838.
13. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F., and Kress J.D. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // Phys. Rev. – 2001. – V. B63. – P. 224106–224112.