

05

## **Атомные механизмы локальных структурных перестроек при деформировании кристаллита титана**

© *Ив.С. Коноваленко, Д.С. Крыжевич, К.П. Зольников, С.Г. Псахье*

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск  
E-mail: ivkon@ispms.tsc.ru

*Поступило в Редакцию 12 мая 2011 г.*

Проведено молекулярно-динамическое моделирование зарождения и развития пластической деформации в кристаллите титана при одноосном растяжении. Межатомное взаимодействие описывалось в рамках метода погруженного атома. Изучены особенности генерации локальных структурных перестроек в кристаллите в зависимости от скорости растяжения. Показано, что существует пороговое значение деформации, при достижении которого в кристаллите начинают зарождаться локальные структурные перестройки. Зарождение пластической деформации в кристаллите сопровождается скачкообразным уменьшением потенциальной энергии. Вследствие инерционности аккомодационных процессов пороговое значение деформации увеличивается с ростом скорости нагружения.

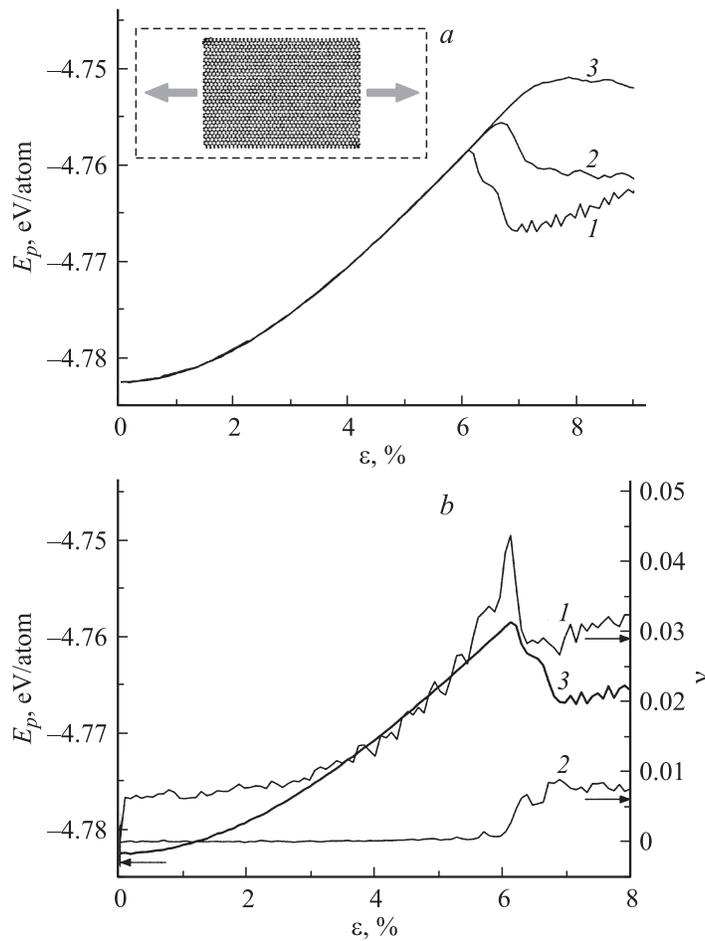
Пластическая деформация в материалах представляет собой сложный процесс, связанный с зарождением и эволюцией дефектов структуры на различных масштабных уровнях [1,2]. Следует отметить, что исследование атомных механизмов, ответственных за генерацию локальных структурных перестроек, является важной фундаментальной проблемой физики твердого тела и современного материаловедения. Это обусловлено тем, что зарождение процессов пластичности начинается на микромасштабном (атомном) уровне, определяя развитие дефектной структуры на более высоких масштабных уровнях. Несмотря на значительные успехи в изучении структурного отклика различных материалов при механическом воздействии, проблема зарождения пластической деформации на атомном уровне изучена недостаточно и продолжает интенсивно исследоваться во многих теоретических и экспериментальных работах [3–5]. Характерные времена и масштабы подобных процессов крайне малы (пикосекунды и ангстремы соответственно).

Это приводит к тому, что экспериментальное изучение зарождения и развития пластической деформации на атомном уровне встречает значительные трудности. Эффективным подходом к решению данной проблемы является компьютерное моделирование. В связи с вышесказанным, целью настоящей работы является молекулярно-динамическое исследование атомных механизмов зарождения и развития структурных перестроек в кристаллите титана при механическом нагружении.

Постановленная задача решалась с использованием многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия, полученных в рамках метода погруженного атома [6]. Используемые потенциалы позволяют с высокой степенью точности описывать упругие, энергетические и структурные свойства моделируемых кристаллитов, адекватно учитывать их свойства вблизи границ раздела [7–9]. Такой подход в явном виде учитывает дискретность структуры моделируемого материала и достаточно адекватно описывает поведение его атомной системы.

Моделируемый кристаллит титана представлял собой прямоугольный параллелепипед (рис. 1, *a*). Равновесные значения параметра решетки составляли  $a = 2.97$  и  $c = 4.68$  Å. Кинетическая температура изучаемого образца до нагружения составляла  $T = 100$  К. На двух противоположных гранях моделируемого кристаллита задавались жесткие граничные условия. Две другие грани образца представляли собой свободные поверхности, а в третьем направлении использовались периодические граничные условия. Жесткие граничные условия использовались для задания одноосного растяжения кристаллита с постоянной скоростью (рис. 1, *a*). Скорости растяжения варьировались в интервале от 10 до 90 м/с.

Результаты расчетов показали, что при растяжении кристаллита его потенциальная энергия монотонно увеличивается с ростом деформации и при достижении некоторого порогового значения, несмотря на продолжающееся нагружение, перестает расти и, более того, начинает уменьшаться (рис. 1, *a*). Этот эффект, как показано в [9–11], связан с началом зарождения и развития пластической деформации. При этом вследствие инерционности аккомодационных процессов пороговое значение деформации увеличивается с ростом скорости нагружения. В то же время на рис. 1, *a* хорошо видно уменьшение скорости спада потенциальной энергии при увеличении скорости деформирования, которое связано с тем, что формирование локальных структурных перестроек „не успевает“ компенсировать рост напряжений, обусловленный продолжающейся деформацией.



**Рис. 1.** Схема нагружения моделируемого кристаллита и зависимости потенциальной энергии ( $E_p$ ) от деформации ( $\varepsilon$ ) для различной скорости растяжения: 1 — 10 m/s, 2 — 50 m/s, 3 — 90 m/s (a). Зависимости изменения доли атомов ( $\nu$ ) в кристаллите со значением вектора смещений  $P_i$  в интервале  $[0.04 \div 0.05]$  (кривая 1),  $[0.06 \div 0.07]$  (кривая 2) и потенциальной энергии ( $E_p$ ) (кривая 3) от деформации ( $\varepsilon$ ); скорость растяжения кристаллита составляла 10 m/s (b).

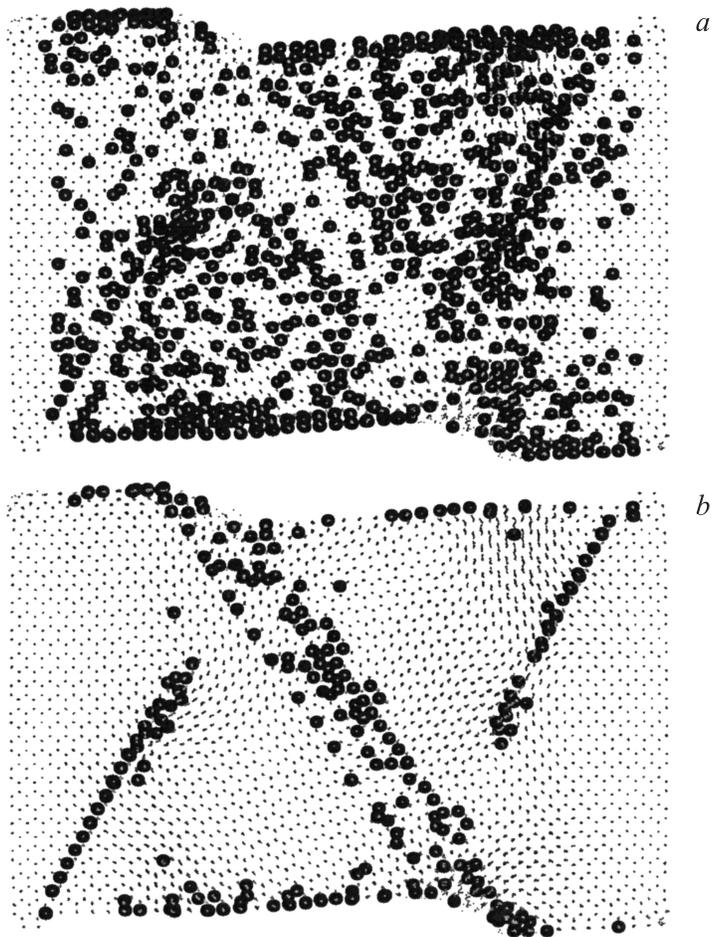
Более детальное изучение зарождения и развития пластической деформации в нагружаемых кристаллитах проводилось на основе анализа динамики относительных атомных смещений, которые оценивались по формуле для приведенного вектора смещений  $\mathbf{P}_i$ :

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

где  $j$  — ближайший сосед атома  $i$ ;  $N_s$  — число ближайших соседей;  $\mathbf{r}^{ij}$  и  $\mathbf{r}_0^{ij}$  — радиус векторы  $j$ -го относительно  $i$ -го в текущем и исходном положениях соответственно. В дальнейшем будем использовать модуль приведенного вектора смещений  $P_i = |\mathbf{P}_i|$ . Для изучения особенностей поведения атомной структуры при деформировании кристаллита анализировались атомные смещения для различных значений приведенного вектора смещений. В работе приведены результаты для двух диапазонов значений ( $P_i$ ): 1) область упругих смещений  $P_i \in [0.04 \div 0.05]$ , 2) область, соответствующая структурным перестройкам,  $P_i \in [0.06 \div 0.07]$ .

Зависимость потенциальной энергии кристаллита и доли атомов с различными значениями приведенного вектора смещений  $P_i$  от деформации приведена на рис. 1, *b*. В процессе деформирования кристаллита доля атомов для всех выбранных интервалов изменения вектора смещений первоначально возрастает (рис. 1, *b*, кривые 1, 2). Однако, начиная с пороговой величины деформации, кривая 1 достаточно быстро падает, а кривая 2 возрастает. Это означает, что доля атомов с упругими смещениями ( $P_i < 0.05$ ) в области порога деформации уменьшается, а доля атомов с большими величинами относительных смещений ( $P_i > 0.06$ ) возрастает, что связано с генерацией локальных структурных перестроек.

Исследование особенностей зарождения пластической деформации в процессе нагружения кристаллита проводилось на основе анализа распределения атомов, локальные смещения которых соответствовали приведенному вектору  $P_i$  в интервале  $[0.04 \div 0.05]$  и  $[0.06 \div 0.07]$ . Проекция структуры нагружаемого кристаллита для деформации  $\varepsilon = 6.6\%$  с указанием атомов, смещения которых лежат в вышеуказанных интервалах, представлена на рис. 2. Из рисунка видно, что распределения атомных смещений для этих двух интервалов хорошо коррелируют друг с другом. В частности, локальные области, в которых относительные атомные смещения превышают величину 0.06 (рис. 2, *b*), практически



**Рис. 2.** Проекция структуры кристаллита при растяжении на 6.69%. Атомы со значением вектора смещений  $P_i$  в диапазоне  $[0.04 \div 0.05]$  (a) и  $[0.06 \div 0.07]$  (b) показаны более крупными сферами. Скорость растяжения кристаллита составляла 10 м/с.

не содержат атомы, для которых  $P_i < 0.05$  (рис. 2, *a*). В то же время анализ показал, что для меньших значений деформации атомы с малыми смещениями были достаточно равномерно распределены по нагружаемому кристаллу. Такое поведение кристаллита означает, что генерация локальных структурных перестроек приводит к снижению уровня упругих напряжений в данных областях. Это соответствует представлениям о том, что структурные дефекты своими упругими полями компенсируют напряжения, обусловленные внешними воздействиями. Об этом свидетельствует также ход изменения кривой 1 и кривой 2 на рис. 1, *b* (первая кривая достаточно быстро уменьшается после достижения пороговой деформации, а другая возрастает). Как показано в [9,11], формирование локальных структурных перестроек имеет термофлукуационную природу.

Исследование поведения локальной структуры атомов, вблизи которых генерируются структурные перестройки, проводилось на основе анализа изменения положения ближайших соседей. Анализ результатов показал, что скачкообразное изменение вектора смещения связано с переходом двух атомов со второй координационной сферы на первую, и соответственно двух атомов с первой координационной сферы на вторую. Из анализа функций радиального распределения следует, что после скачкообразного изменения вектора смещения пик, соответствующий первой координационной сфере, становится более узким, что связано с локальными восстановлениями регулярной атомной структуры.

Проведенные расчеты показали, что при достижении пороговой деформации в кристаллите титана происходит перераспределение упругой энергии. При этом доля атомов с упругими смещениями ( $P_i < 0.05$ ) уменьшается вследствие формирования локальных структурных перестроек, т.е. возрастает доля атомов с  $P_i > 0.06$ . Генерация локальных структурных перестроек ведет к компенсации упругих напряжений, вызванных деформированием кристалла. Показано, что локальные структурные перестройки определяются атомными переходами между первой и второй координационными сферами. С ростом интенсивности нагружения пороговая величина деформации, при достижении которой в кристаллите начинают генерироваться дефекты структуры, увеличивается. Это обусловлено „инерционностью“ релаксационных процессов в материале при навязанном механическом нагружении.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований СО РАН, 2010–2012 гг., III.20.2. „Научные основы создания материалов и покрытий с неравновесными структурно-фазовыми состояниями на основе многоуровневого подхода“ и при частичной финансовой поддержке проекта РФФИ (№ 09-08-00498-а).

## Список литературы

- [1] Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985. 229 с.
- [2] Гриняев Ю.В., Псахье С.Г., Чертова Н.В. // Физическая мезомеханика. 2009. Т. 12. № 4. С. 27–42.
- [3] Sandoz F, Dupont V. // Materials Science and Engineering C. 2007. V. 27. Iss. 5–8. P. 1509–1513.
- [4] Gröger R., Vitek V. // Acta Materialia. 2008. V. 56. Iss. 19. P. 5426–5439.
- [5] Liu P., Mao S.C., Wang L.H., Han X.D., Zhang Z. // Scripta Materialia. 2011. V. 64. Iss. 4. P. 343–346.
- [6] Ackland G.J. // Philosophical Magazine A. 1992. V. 66. Iss. 6. P. 917–932.
- [7] Saraev D., Miller R.E. // Acta Materialia. 2006. V. 54. Iss. 1. P. 33–45.
- [8] Shimomura Y., Kiritani M., Mukouda I. // Materials Science and Engineering A. 2003. V. 350. Iss. 1–2. P. 238–244.
- [9] Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S. // Physics Letters A. 2007. V. 367. Iss. 3. P. 250–253.
- [10] Псахье С.Г., Зольников К.П., Крыжевич Д.С., Томенцев А.Н. // Физическая мезомеханика. 2005. Т. 8. № 5. С. 55–60.
- [11] Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Lipnitskii A.G. // Physics Letters A. 2006. V. 349. Iss. 6. P. 509–512.