

Атомистическое моделирование пластичности и разрушения нанокристаллической меди при высокоскоростном растяжении

© А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин

Объединенный институт высоких температур Российской академии наук,
125412 Москва, Россия
Московский физико-технический институт (Государственный университет),
141700 Долгопрудный, Московская обл., Россия
E-mail: yanilkin@ihed.zas.ru

(Поступила в Редакцию 12 ноября 2007 г.
В окончательной редакции 15 марта 2008 г.)

С помощью метода молекулярной динамики на примере меди исследуется процесс пластической деформации и начала разрушения нанокристаллических металлов. Рассмотрены последовательные стадии отклика микроструктуры металла на деформацию: зернограничное проскальзывание, зарождение и перемещение дислокаций, образование и рост зародышей микроразрывов. Проведено исследование влияния на пластичность и прочность размера зерна нанокристалла.

Работа выполнена при финансовой поддержке по программам фундаментальных исследований РАН № 3 и 9, гранту РФФИ № 05-08-65423, а также в рамках проектов Министерства образования и науки РФ РНП2.1.712 и 2007-3-1-1.3-25-01-397 и контракта с Национальными лабораториями Сандия по программе US DOE/NNSA ASC.

PACS: 64.70.Nd, 62.20.fq, 62.20.mm, 83.10.Rs

1. Введение

В последние годы все большее внимание привлекают нанокристаллические материалы, которые благодаря своим структурным особенностям обладают целым рядом уникальных свойств и имеют огромные перспективы разнообразного технологического применения [1]. В настоящей работе исследуются механические свойства нанокристаллических материалов (поликристаллических материалов с характерным размером зерна до нескольких сотен нанометров), которые существенно отличаются от свойств обычных крупнозернистых материалов. Следует отличать их от нанокристаллов [2,3], представляющих собой кластеры нанометрового размера. Нанокристаллические металлы могут демонстрировать высокую прочность и пластичность [1,4–8]. Значительные успехи достигнуты в теоретическом описании механизмов деформирования нанокристаллов [9–12].

В настоящей работе рассматривается поведение нанокристаллической меди на атомистическом уровне с помощью метода молекулярной динамики (МД). В первой части работы исследуются механизмы пластического течения. В расчетах наблюдается увеличение предела текучести с ростом размера зерна. Результаты свидетельствуют о том, что при небольших деформациях основную роль играет зернограничное проскальзывание, при увеличении степени деформации существенный вклад вносит движение дислокаций, которые зарождаются и поглощаются на межзеренных границах, обеспечивая сдвиг одной части зерна относительно другой. Вторая часть работы посвящена исследованию начального этапа разрушения поликристаллов при высокоскоростном растяжении. Показано, что процесс образования полостей

носит случайный характер по времени, при этом полости формируются в определенных местах межзеренной границы, что связано с локальной концентрацией напряжений. Рассматривается зависимость предельно достижимого давления от среднего размера зерна. С уменьшением размера зерна наблюдается увеличение порогового напряжения образования несплошностей, что связано с ускоренной релаксацией напряжений из-за большей пластичности материала с меньшими зёрнами.

2. Модель и метод расчета

Для моделирования поликристаллической меди используется расчетная ячейка в форме куба, в которой по методу Вороного [9] создается зеренная структура с нулевой пористостью в отличие, например, от пористых структур, рассмотренных в [13]. В данном случае поры в системе отсутствовали. Центры зерен и кристаллографические направления распределяются по МД-ячейке случайно. На МД-ячейку накладываются трехмерные периодические граничные условия. В расчетах использовались следующие средние размеры зерен $d = 3.5, 4.5, 6, 9, 13.5$ nm при общем числе атомов в расчетной ячейке $N = (5-16) \cdot 10^5$, что для размера $d = 3.5$ nm соответствует 4000 частиц в зерне (отношение числа частиц в расчетной ячейке к числу зерен). Для описания межатомного взаимодействия в меди используется многочастичный потенциал погруженного атома (embedded atom method potential) [14]. Вначале система приводилась в равновесие в течение 50 ps при температуре $T = 300$ K и нулевом давлении. Затем система растягивалась вдоль одного направления с постоянной скоростью \dot{V} . Рас-

тяжение моделировалось масштабированием координат атомов на каждом шаге численного интегрирования. Для поддержания постоянной температуры использовался термостат Ланжевена. В поперечных направлениях решетка оставалась недеформированной. Подобные условия деформирования реализуются в быстропротекающих процессах, когда не успевает происходить релаксация в поперечных направлениях, в частности, при прохождении плоских ударных волн.

Анализ поликристаллической структуры проводился с помощью параметра центральной симметрии C_i [15], характеризующего степень симметрии локального окружения каждого атома (i — номер атома). Он позволяет выделять межзеренные границы, плоскости сдвига и дислокации. Для наблюдения процессов релаксации был введен параметр D_i , определяемый смещением одиночного атома из его начального положения, характеризующий локальную подвижность атомов $D_i = |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|$, где i — номер атома.

3. Результаты

3.1. Стадия пластической деформации. На рис. 1 представлен график зависимости напряжения вдоль оси растяжения σ_{xx} и девиатор напряжения $\sigma_d = \sigma_{xx} - (\sigma_{yy} + \sigma_{zz})/2$ в зависимости от степени растяжения при скорости растяжения $\dot{V}/V_0 = 10^9 \text{ s}^{-1}$ (здесь V — объем системы в текущий момент времени, а V_0 — в начальный) и температуре $T = 300 \text{ K}$. На начальном участке наблюдается практически упругое поведение. Постепенно зависимость девиатора отклоняется от ли-

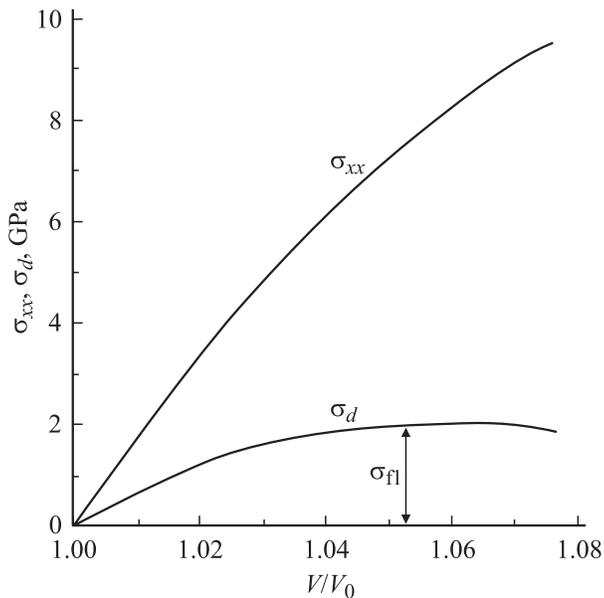


Рис. 1. График зависимости напряжения вдоль оси растяжения σ_{xx} и девиатора напряжений $\sigma_d = \sigma_{xx} - (\sigma_{yy} + \sigma_{zz})/2$ в зависимости от степени растяжения. Размер системы $N = 5 \cdot 10^5$ атомов, скорость растяжения $\dot{V}/V_0 = 10^9 \text{ s}^{-1}$, средний размер зерна $d = 9 \text{ nm}$.

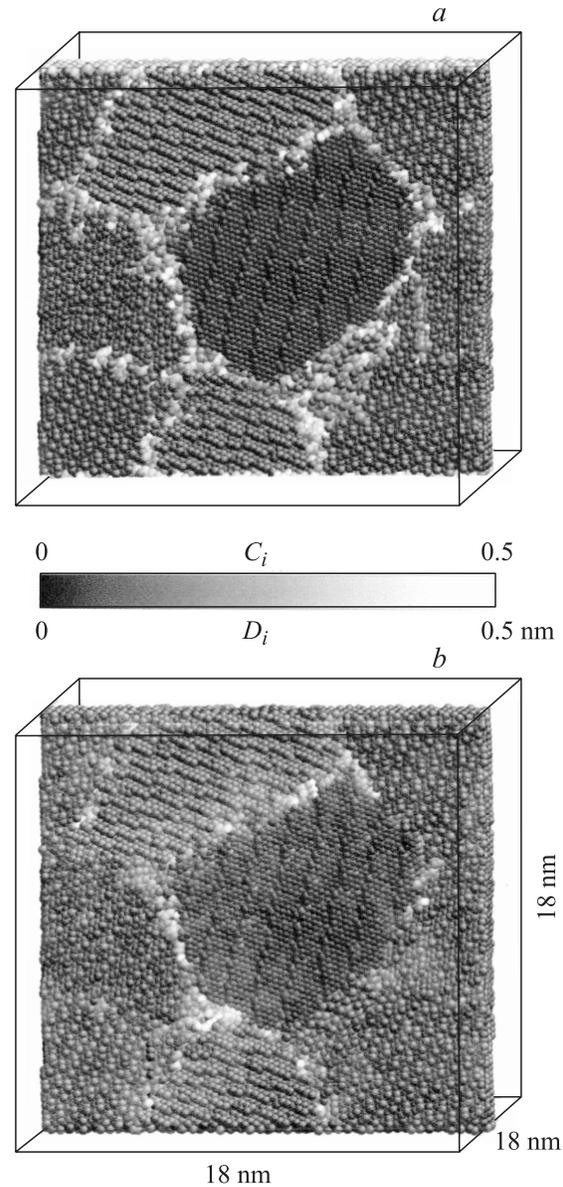


Рис. 2. Срезы системы после 40 ps релаксации при $V/V_0 = 1.06$. Средний размер зерна $d = 9 \text{ nm}$. a — шкала оттенков по параметру центральной симметрии C_i . Светлым показаны атомы с нарушенной локальной симметрией, соответствующие границам зерен и сдвиговым плоскостям; b — шкала оттенков по параметру D_i , характеризующему смещение атома от его положения в момент начала релаксации. Светлым показаны атомы, наиболее смещенные относительно начального положения. В центре представлена шкала оттенков по параметрам C_i и D_i .

нейной, и при $V/V_0 \approx 1.03$ наблюдается переход от упругого поведения к пластическому и выход девиатора напряжений на постоянное значение, равное пределу текучести $\sigma_{fl} = 1.9 \text{ GPa}$.

На рис. 2, a приведена зернограничная структура среза ячейки при степени растяжения $V/V_0 = 1.06$, окраска атомов соответствует параметру C_i . На рис. 2, b пред-

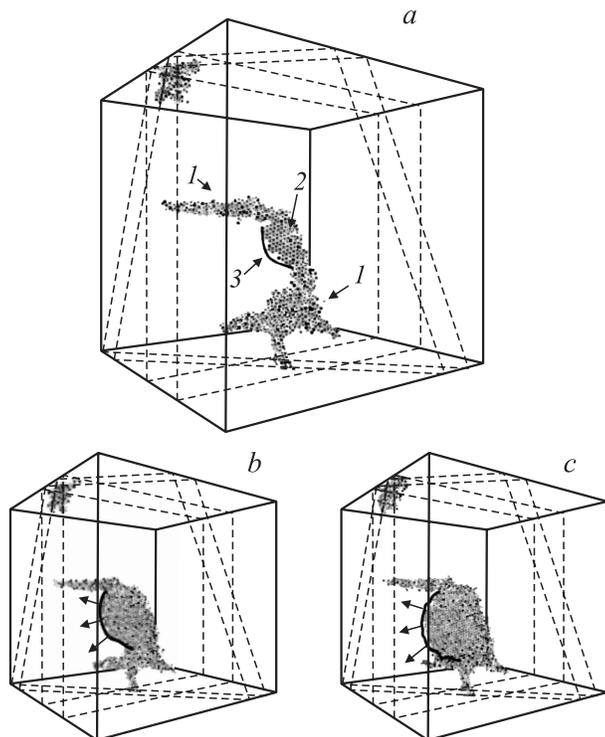


Рис. 3. Образование плоскости сдвига в результате движения частичной дислокации. Показаны только атомы с нарушенной симметрией локального окружения ($0.04 < C_i < 0.5$), находящиеся на пересечении двух срезов расчетной ячейки (выделенные штриховыми линиями). $\dot{V}/V_0 = 10^9 \text{ s}^{-1}$, средний размер зерна $d = 9 \text{ nm}$. 1 — межзеренная граница, 2 — плоскость сдвига, 3 — частичная дислокация (жирная сплошная линия). Представлены три последовательных положения дислокации, в результате движения которой происходит рост дефектов упаковки: *a* — 63 ps, *b* — 70 ps, *c* — 76 ps. На частях *b* и *c* стрелками показаны направления движения дислокации.

ставлен тот же срез, но атомы раскрашены соответственно их смещениям из начальных положений D_i при расчете с той же фиксированной степенью растяжения. Видно, что наиболее подвижные атомы (светлые) находятся на границах зерен. Релаксация напряжений также обеспечивается подвижностью дислокаций. На рис. 3 представлены характерные моменты движения частичной дислокации.

Зарождение дислокации происходит на межзеренной границе, затем она распространяется внутрь зерна, обеспечивая сдвиг одной части зерна относительно другой. На рис. 3 выделена частичная дислокация, движение которой приводит к образованию плоскости сдвига. Поскольку энергия дефекта упаковки в меди невелика (44.4 mJ/m^2 для используемой модели межатомного взаимодействия [14]), ширина (диссоциировавшей) дислокации превышает или имеет тот же порядок, что и размер зерна. Поэтому при рассматриваемых размерах зерен невозможно наблюдать образование второй частичной дислокации (дислокационной пары). При небольших

степенях растяжения число дислокаций мало, и все пластическое деформирование обеспечивается зернограничным проскальзыванием. Концентрация дислокаций сильно возрастает с увеличением степени растяжения практически вплоть до перехода в текучее состояние, что приводит к увеличению скорости пластической деформации. В настоящей работе появление дислокаций наблюдалось при всех размерах зерен.

На рис. 4 представлены параметры текучести по данным МД-расчетов и экспериментальные данные. Качественное объяснение существования максимума на зависимости предела текучести от размера зерна состоит в изменении относительных вкладов двух процессов пластического деформирования: зернограничного проскальзывания и движения дислокаций в зерне [9–12].

Область размеров зерен меньше 100 nm довольно сложна для экспериментального изучения, поскольку трудно изготовить образец с узкой функцией распределения зерен по размерам. Поэтому, в частности, в экспериментальных результатах присутствует существенный разброс максимальных значений предела текучести. В этом случае МД-расчеты являются вспомогательным инструментом, обеспечивающим подход со стороны малых зерен. Необходимо отметить, что в силу вычислительных ограничений МД в настоящее время не удастся воспроизводить реальные распределения зерен в материале по размерам. Можно считать, что МД-модели нанокристаллов близки к монодисперсным.

Расчеты, проведенные в [16] и в настоящей работе, различаются использованием разных потенциалов взаимодействия для описания меди, а также различными способами деформации. В модели, рассмотренной в

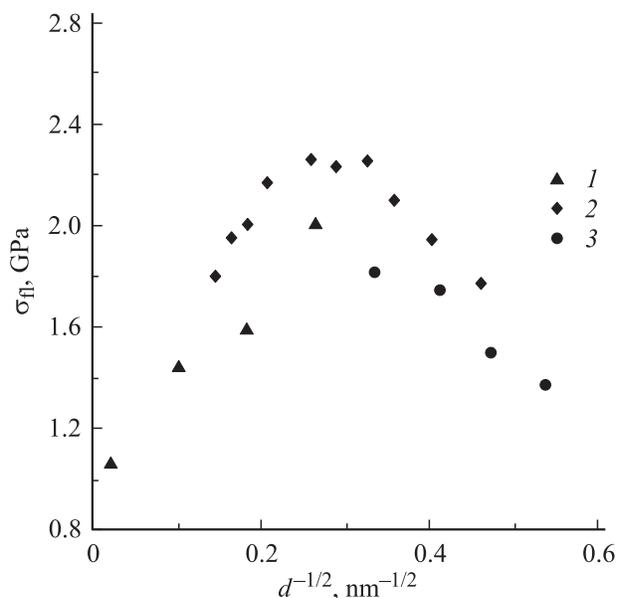


Рис. 4. Зависимость предела текучести от среднего размера зерна. 1 — экспериментальные данные [6], 2 — МД-расчеты [16] ($\dot{V}/V_0 = 10^8 \text{ s}^{-1}$), 3 — результаты, полученные в настоящей работе ($\dot{V}/V_0 = 10^9 \text{ s}^{-1}$).

нашей работе, размер ячейки вдоль поперечных направлений остается постоянным при деформировании, тогда как в [16] он изменяется для поддержания нулевого напряжения в поперечных направлениях.

3.2. Стадия начала разрушения. Растяжение кристалла не может происходить бесконечно, доступная область отрицательных давлений ограничивается спинодалию [17,18]. Потеря устойчивости образца (в том числе и при высокоскоростной деформации) происходит до достижения спинодали, что связано с конечным временем жизни в метастабильной области. Рассмотрим подробнее, как меняются пределы растяжения и механизмы разрушения нанокристаллов в сравнении с бездефектными кристаллами. На рис. 5, *a* представлена диаграмма растяжения поликристаллической меди со скоростью деформирования $\dot{V}/V_0 = 10^9 \text{ s}^{-1}$ при температуре $T = 300 \text{ K}$.

Растяжение монокристаллической меди со скоростью, доступной в МД-моделях, позволяет наблюдать спонтанное зарождение полостей только вблизи спинодали. Дело в том, что в бездефектном монокристалле частота нуклеации (скорость зарождения полостей) резко зависит от степени близости к границе устойчивости. Это обстоятельство приводит к тому, что частота кавитации $J > 1/(\tau V)$, обеспечивающая появление полости в заданном объеме ячейки V за ограниченное время расчета τ , достигается в монокристалле лишь около границы устойчивости. В результате предельно достижимое напряжение (σ_{max}) практически не зависит от скорости растяжения [19]. Для поликристалла наблюдается значительное снижение σ_{max} по сравнению с монокристаллом (рис. 5, *a*). Такое снижение обусловлено тем, что в поликристалле присутствуют участки с сильно дефектной структурой (межзеренные границы и их стыки), в которых вероятность возникновения полостей значительно больше, чем в идеальном кристалле (рис. 5, *b*). Аналогичная ситуация наблюдается и в монокристаллах, имеющих остаточные неоднородности структуры, образовавшиеся в результате предшествующей пластической деформации [20].

Механизм образования полостей похож на тот, который наблюдается в монокристаллах: нуклеационным путем возникают небольшие сферические полости, которые увеличиваются в размерах под действием растягивающих напряжений. Зарождение полостей в бездефектном кристалле происходит в произвольный момент времени в произвольной точке объема, каких-либо выделенных мест нет. На этом основываются различные кинетические модели разрушения (см., например, [21]). В поликристалле ситуация существенно иная. Были проведены расчеты разрушения одной и той же системы при различных скоростях растяжения. В зависимости от скорости растяжения образование полостей происходило при разных значениях степени деформации, но в одних и тех же местах внутри системы, на межзеренных границах (рис. 5, *b*). В данном случае главную роль играет тот факт, что в области межзеренных границ

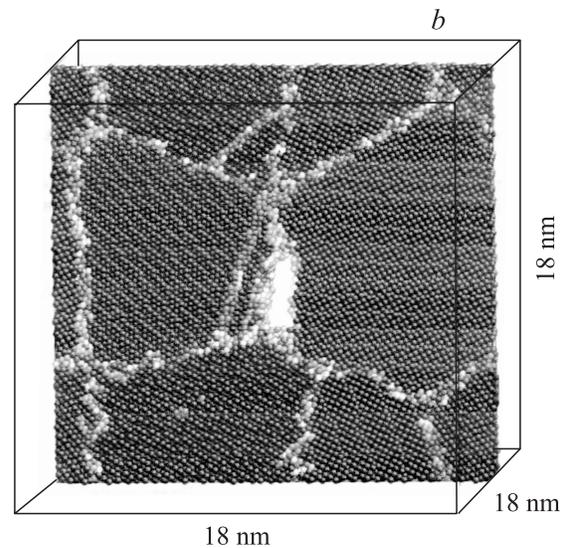
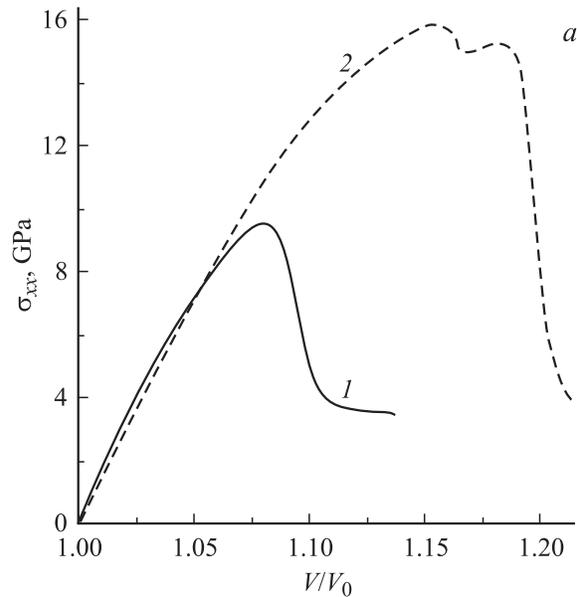


Рис. 5. *a*) Зависимость напряжения от степени растяжения при $\dot{V}/V_0 = 10^9 \text{ s}^{-1}$. 1 — поликристалл Cu со средним размером зерна $d = 9 \text{ nm}$, 2 — монокристалл, растяжение вдоль кристаллографического направления [100]. *b*) Срез расчетной ячейки в момент роста полостей (отмечен стрелкой на части *a*). Шкала оттенков для различных атомов аналогична показанной на рис. 2, *a*.

существуют места с локальной концентрацией напряжений, возникновение полостей в которых происходит при меньших степенях растяжения.

В процессе разрушения кристалла можно выделить следующие этапы: зарождение и рост полостей, разрастание полостей вдоль межзеренных границ, ведущее к образованию микротрещин. На рис. 6 представлена характерная зависимость абсолютного значения давления в процессе релаксации из исходного состояния при фиксированной степени растяжения $V/V_0 = 1.064$. Зародыш хорошо выделяется, если оставить только атомы с высо-

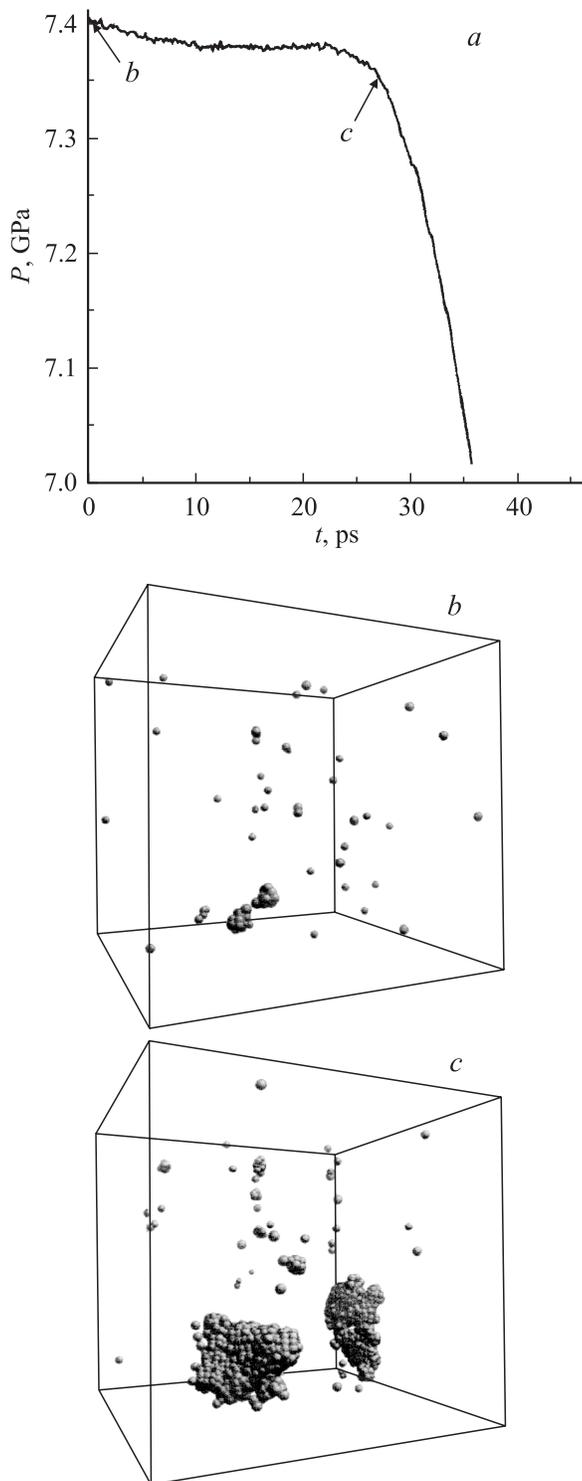


Рис. 6. Спонтанное формирование микротрещины вдоль межзеренной границы. *a* — зависимость абсолютного значения давления от времени при фиксированной степени растяжения $V/V_0 = 1.064$. На частях *b* и *c* показаны атомы, образующие границу зарождающейся полости (с потенциальной энергией более -3.14 eV) в последовательные моменты времени, отмеченные на части *a* и отражающие две стадии образования микротрещины.

ким значением потенциальной энергии $E_{\text{pot}} > -3.14$ eV. Распределение атомов с соответствующей энергией в объеме системы для двух моментов времени представлено на рис. 6, *b*, *c*. Зародыш полости уже существует в системе в начальный момент времени. Он „живет“ довольно продолжительное время (около 25 ps в данном случае), практически не изменяясь в размерах. Затем происходит быстрое образование микротрещины, что приводит к быстрой релаксации напряжений. Момент образования микротрещины является случайным. Это дает возможность ввести в рассмотрение скорость зарождения микротрещин, вычисляемую через среднее время жизни поликристалла до начала быстрого процесса релаксации. Данная величина может служить характеристикой кинетики появления микротрещин при заданных макропараметрах и структуре системы (средний размер зерна).

Основным фактором, влияющим на образование зародыша полости и соответственно на величину предельно достижимого напряжения, является возникновение мест с локальной концентрацией напряжений. Релаксация внутренних локальных напряжений происходит за счет локальных пластических деформаций. Это находит отражение в зависимости предельно достижимого напряжения σ_{max} от среднего размера зерна (рис. 7, *a*). С одной стороны, при уменьшении размера зерен доля атомов, принадлежащих межзеренной границе, увеличивается, что должно приводить к падению σ_{max} . С другой стороны, уменьшение зерен приводит к уменьшению предела текучести, а следовательно, и к увеличению скорости релаксации локальных напряжений, в результате величина σ_{max} возрастает. Проведенные расчеты показывают, что наибольшее влияние оказывает второй эффект, обусловленный пластичностью нанокристаллической структуры.

На рис. 7, *b* представлены значения σ_{max} , найденные в настоящей работе при размере зерна 9 nm, МД-данные других авторов (главные различия состоят в том, что в [22] рассматривается модель ударник–мишень и используется другая модель потенциала межатомного взаимодействия для меди, а в [23] рассмотрена модель пористого твердого тела) и данные по откольной прочности, полученные из экспериментов с ударными волнами [24–26], в зависимости от скорости деформирования. Из рисунка видно, что полученные в настоящей работе результаты для поликристаллической меди имеют характер степенной зависимости $\sigma_{\text{max}} \sim (\dot{V}/V_0)^m$ и хорошо согласуются с экспериментальными данными и результатами [23], хотя экспериментальная и рассчитанная нами зависимости имеют разный показатель степени m . Возможно, это обстоятельство связано с тем, что в нашей модели рассматривается только начальный этап разрушения, а в структуре модели отсутствуют поры и микротрещины, которые способствуют разрушению в реальном материале. Значения σ_{max} для монокристаллов практически не зависят от скорости деформирования и для меди близки к оценкам теоретической разрывной

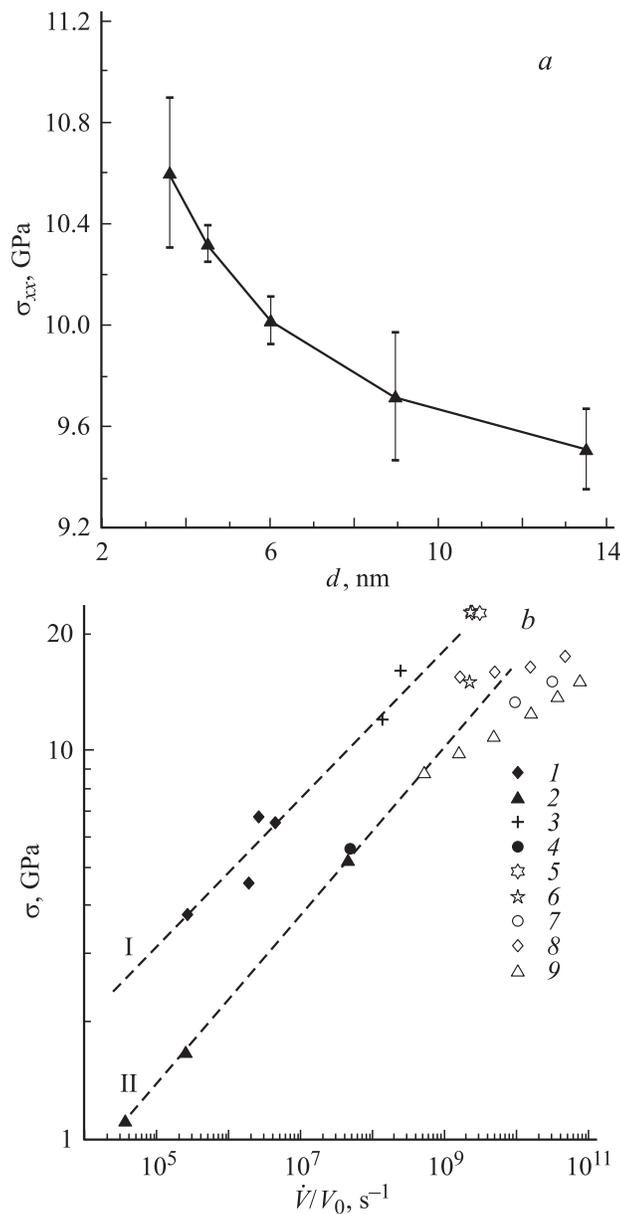


Рис. 7. Зависимости предельно достижимого напряжения от среднего размера зерна (a) и откольной прочности от скорости деформирования (b). Эксперименты с ударными волнами: 1 — монокристаллы [24], 2 — поликристаллы [24], 3 — монокристаллы [25], 4 — поликристаллы [26]. Штриховые линии — экстраполяция экспериментальных данных для монокристаллов (I) и поликристаллов (II). МД-расчеты: 5, 6 — модель ударник–мишень [22] (5 — монокристаллы, 6 — поликристаллы), 7 — модель пористого твердого тела [23]. 8, 9 — результаты настоящей работы для монокристаллов и поликристаллов соответственно.

прочности [27]. Это связано, по-видимому, с использованием в расчетах идеальных монокристаллов, в исходном состоянии не включающих в себя какие-либо дефекты. С увеличением скорости растяжения значения σ_{max} для монокристаллов и поликристаллов сближаются, приближаясь к теоретической максимальной прочности.

Определение механизмов процесса разрушения, обуславливающих степенную зависимость откольной прочности от скорости деформации, представляет существенный интерес. Из результатов настоящей работы следует, что введение в МД-модель зеренной структуры позволяет получить лучшее согласие с экспериментальными данными по сравнению с монокристаллическими моделями [19] (аналогичное замечание справедливо и для работы [23], где рассматривается пористая структура). Отметим, что в бездефектных структурах в рамках дискретных моделей вещества удается получить степенную зависимость откольной прочности (вычисляемую косвенным образом по величине порогового значения скорости ударника, приводящего к отколу) от скорости деформации [28]. В данном случае, по-видимому, существенно трактовка частиц в модели как структурных элементов материала. Расчеты в этом диапазоне скоростей деформации в МД-моделях показывают, что значения предельно достижимого напряжения σ_{max} в данном режиме деформации превышают теоретическую разрывную прочность. В таком случае имеет место динамический режим откола, характеризующийся тем, что кинетической энергии частиц в откалывающейся части достаточно для разрыва связей в веществе. В этом случае механизм откола отличается от случая, при котором зарождение очагов разрушения на атомном уровне происходит нуклеационно в результате флуктуаций (см., например, [20]).

4. Заключение

В настоящей работе на основе метода молекулярной динамики проведено исследование процессов пластической деформации и разрушения нанокристаллической меди. Результаты моделирования свидетельствуют о том, что в нанокристаллической меди в рассмотренном диапазоне размеров зерна (3.5–13.5 nm) пластическая деформация обусловлена как дислокационным движением внутри зерна, так и зернограницным проскальзыванием (перемещением атомов вдоль межзеренных границ). Получена зависимость предела текучести от среднего размера зерна, которая хорошо согласуется с экспериментальными данными и дает оценку максимального предела текучести. Проведено моделирование начальной стадии разрушения нанокристаллической меди. Показано, что зарождение полостей происходит в определенных местах, являющихся локальными концентраторами напряжений. Полученная зависимость предельно достижимого напряжения в момент потери сплошности от размера зерна обусловлена изменением скорости релаксации локальных напряжений, т.е. связана с пластическими свойствами нанокристаллического материала. Таким образом, изменяя пластические свойства, можно влиять на предел разрушения и прочностные свойства. Результаты расчетов предельно достижимых растягивающих напряжений находятся в согласии с экспериментальными значениями откольной прочности поликристаллов.

Авторы выражают признательность В.Е. Фортову и Г.И. Канелю за полезные обсуждения и интерес к настоящей работе.

Список литературы

- [1] I.A. Ovid'ko, T. Tsakalakos, A.K. Vasudevan. Synthesis, functional properties and applications of nanostructures. Kluwer, Dordrecht (2003). 655 p.
- [2] I.F. Golovnev, E.I. Golovneva, V.M. Fomin. Comput. Mater. Sci. **37**, 336 (2006).
- [3] S.A. Kotrechko, A.V. Filatov, A.V. Ovsjannikov. Theor. Appl. Fract. Mech. **45**, 92 (2006).
- [4] В.А. Поздняков, А.М. Глезер. ФТТ **47**, 793 (2005).
- [5] Б.И. Смирнов, В.В. Шпейзман, В.И. Николаев. ФТТ **47**, 816 (2005).
- [6] R.W. Siegel, G.E. Fougere. Nanostruct. Mater. **6**, 205 (1995).
- [7] R. Valiev. Nature Mater. **3**, 511 (2004).
- [8] М.И. Алымов, А.И. Епишин, Г. Нольце, Т. Линк, С.С. Бедов, А.Б. Анкудинов. Российские нанотехнологии **2**, 124 (2007).
- [9] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A. Mukherjee, H. Gleiter. Acta Mater. **53**, 1 (2005).
- [10] H. Van Swygenhoven, J.R. Weertman. Mater. Today **9**, 24 (2006).
- [11] Г.А. Малыгин. ФТТ **49**, 961 (2007).
- [12] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Успехи механики **1**, 69 (2003).
- [13] А.М. Krivtsov. Meccanica. **38**, 61 (2003).
- [14] Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, J.D. Kress. Phys. Rev. B **63**, 224 106 (2001).
- [15] C.L. Kelchner, S.J. Plimpton, J.C. Hamilton. Phys. Rev. B **58**, 11 085 (1998).
- [16] K.W. Jakobsen, J. Schiotz. Science **301**, 1357 (2003).
- [17] В.П. Скрипов, М.З. Файзуллин. Фазовые переходы кристалл-жидкость-пар и термодинамическое подобие. Физматлит, М. (2003). 160 с.
- [18] А.Ю. Куксин, Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов. ТВТ **45**, 43 (2007).
- [19] Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ТВТ **45**, 193 (2007).
- [20] В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ЖЭТФ **131**, 1064 (2007).
- [21] А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин. ДАН **413**, 615 (2007).
- [22] V. Dremov, A. Petrovtsev, P. Sapozhnikov, M. Smirnova, D.L. Preston, M.A. Zocher. Phys. Rev. B **74**, 144 110 (2006).
- [23] T. Germann, S. Valone. Report N LA-UR-05-7623.
- [24] С.В. Разоренов, Г.И. Канель. ФММ **11**, 141 (1992).
- [25] E. Moshe, S. Eliezer, Z. Henis, M. Werdiger, E. Dekel, Y. Horovitz, S. Maman, I.B. Goldberg, D. Eliezer. Appl. Phys. Lett. **76**, 1555 (2000).
- [26] D. Paisley, R. Warnes, R. Kopp. In: Progress in shock compression of condensed matter-1991/Eds S.C. Schmidt, R.D. Dick, J. Forbes, D.G. Tasker. Elsevier, N. Y. (1992). P. 825.
- [27] А.И. Слуцкер. ФТТ **46**, 1606 (2004).
- [28] Д.А. Индейцев, А.М. Кривцов, В.П. Ткачев. ДАН **407**, 341 (2006).