

06

Влияние скорости и направления деформирования на процесс фрагментации монокристалла меди при двухсторонней ковке

© К.П. Зольников, Д.С. Крыжевич, А.В. Корчуганов, С.Ю. Коростелев, О.А. Березиков

Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина СО РАН, Томск, Россия
E-mail: kryzhev@ispms.ru

Поступило в Редакцию 14 апреля 2026 г.
В окончательной редакции 18 июня 2026 г.
Принято к публикации 27 июня 2026 г.

Проведено молекулярно-динамическое моделирование особенностей фрагментации монокристаллов Cu при двухсторонней ковке. Изучено влияние ориентации монокристалла и скорости деформирования на фрагментацию структуры. Показано, что фрагментация обусловлена зарождением дислокационных стенок, формирующихся при взаимодействиях дислокаций с двойниками. Сформированные фрагменты существенно очищаются от дефектов структуры в процессе нагружения.

Ключевые слова: металлы, двухсторонняя ковка, молекулярная динамика, дислокационные стенки, двойники, механизмы фрагментации структуры.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.19.63598.20733

Механические свойства металлических материалов во многом определяются их микроструктурой. Для формирования заданной микроструктуры часто используют различные методы механической обработки, при которой материал подвергается интенсивной пластической деформации [1–3]. В процессе механообработки структура материала фрагментируется под действием сжимающей нагрузки. В результате в образце формируются кристаллические зерна субмикронного и нанометрового размера. Атомные механизмы, лежащие в основе фрагментации зеренной структуры, очень сложны и малоизучены. Значительные трудности эмпирических подходов к исследованию указанных выше вопросов могут быть достаточно эффективно преодолены в рамках использования компьютерного моделирования. Так, динамика изменений микроструктуры в деформируемом материале, включая генерацию и движение дислокаций, миграцию границ зерен, изменения ориентации зерен друг относительно друга, может быть детально описана в рамках метода молекулярной динамики [4].

Медные материалы широко используются в различных практических приложениях. Возможности дальнейшего улучшения таких эксплуатационных свойств меди, как прочность и пластичность, могут быть реализованы посредством соответствующих изменений микроструктуры. Структурные трансформации в Cu при равноканальном угловом прессовании с помощью молекулярной динамики изучались в [5]. Результаты моделирования показали, что начальная ориентация монокристалла оказывает существенное влияние на его деформационное поведение и экструзию.

Несмотря на свою эффективность, молекулярно-динамический подход редко используется для изучения динамики структурных перестроек, приводящих к фрагментации зерен в процессе интенсивной пластической

деформации. В настоящей работе изучены атомные механизмы фрагментации монокристаллических образцов Cu в условиях двухстороннейковки. Выявлено влияние ориентаций моделируемых образцов относительно направлений сжатия и скоростей деформирования на особенности изменений микроструктуры.

Решение поставленных задач проводилось на основе молекулярно-динамического подхода с помощью программного пакета LAMMPS [6] применительно к двум монокристаллическим образцам Cu, имеющим форму параллелепипедов. Ребра одного из монокристаллов были ориентированы вдоль направлений $[110]$, $[001]$ и $[1\bar{1}0]$ (образец № 1), а другого — вдоль $[100]$, $[010]$ и $[001]$ (образец № 2). Межатомное взаимодействие описывалось многочастичным потенциалом [7]. Используемый потенциал с высокой точностью описывает энергии формирования и миграции точечных дефектов, упругие модули, параметр решетки, температуру плавления Cu, что является важным условием для корректного решения поставленных задач. Во всех направлениях моделировались периодические граничные условия. Количественная оценка степени сжатия проводилась на основе расчета истинной деформации. Двухсторонняя ковка задавалась посредством уменьшения межатомных расстояний последовательно вдоль следующих из указанных выше направлений: сначала в направлении $[110]$, затем в направлении $[001]$ для образца № 1; сначала в направлении $[001]$, затем в направлении $[010]$ для образца № 2. В первом направлении образцы сжимались до $\sim 26\%$, во втором — до 11% истинной деформации. Для поддержания нулевого давления использовался баростат Нозе–Гувера. Исходные размеры образцов составляли $20 \times 20 \times 50$ nm. Скорость сжатия образцов в разных расчетах составляла 5 или 20 m/s. Высокие скорости деформирования материалов характерны для

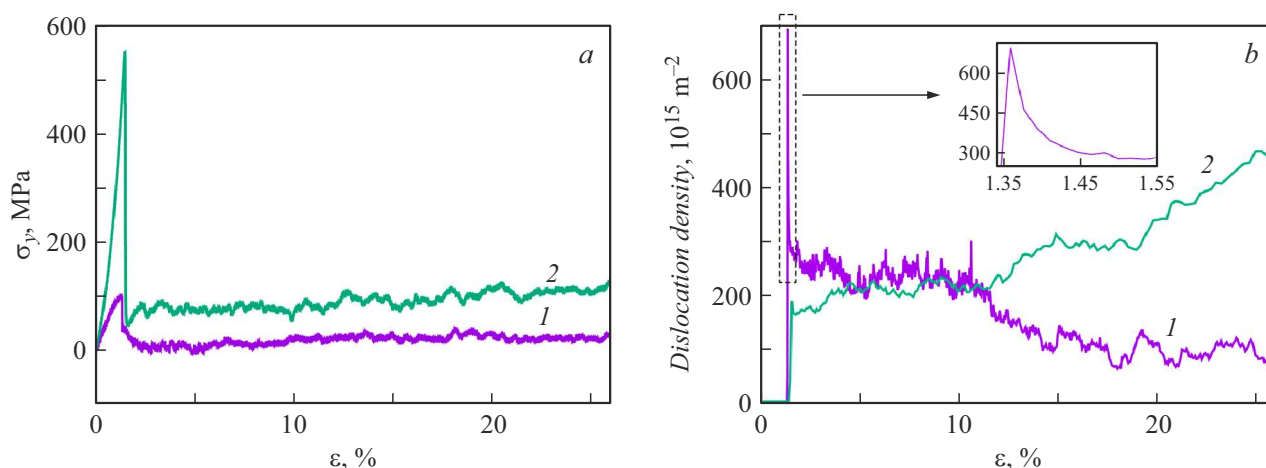


Рис. 1. Зависимости сжимающих напряжений (*a*) и плотности дислокаций (*b*) от истинной деформации при сжатии вдоль первого направления. Номера кривых соответствуют номерам образцов. Цветной вариант рисунков представлен в электронной версии статьи.

молекулярно-динамических расчетов и обусловлены необходимостью моделирования представительных объемов образцов. Температура моделируемых образцов задавалась равной 300 К, и ее величина в процессе нагружения поддерживалась постоянной с помощью термостата. Термолизация проводилась в течение 12 ps с помощью термостата Нозе–Гувера с нормальным начальным распределением скоростей. Шаг интегрирования составлял 1 fs. Определение углов ориентаций и идентификация дефектов структуры проводились методом совпадающих многогранников [8]. Для визуализации структуры моделируемых образцов использовался пакет OVITO [9].

Результаты расчетов показали, что ориентация монокристалла Си относительно направлений деформирования оказывает существенное влияние на возможность фрагментации структуры. Обнаружено, что фрагментация структуры происходит только в образце № 2 в процессе второго сжатия. Для обоих образцов при деформировании в основном генерируются дефекты упаковки и небольшое число двойников. На рис. 1, *a* представлены зависимости напряжений сжатия от истинной деформации при деформировании образцов вдоль первого направления. Из рисунка видно, что модуль упругости, предел упругости и напряжение текучести для образца № 2 существенно выше, чем для образца № 1. Оба образца показали скачкообразный рост плотности дислокаций после достижения предела упругости (рис. 1, *b*). Однако при дальнейшем увеличении деформации в образце № 1 наблюдается лавинообразное падение дислокационной плотности (вставка на рис. 1, *b*) с последующей тенденцией к почти трехкратному уменьшению плотности в конце интервала нагружения. Такая эволюция структуры образца № 1 обусловлена более высокой интенсивностью протекания процесса аннигиляции дислокаций по сравнению с процессом их генерации. В случае образца № 2 плотность дислокаций на

протяжении всего процесса сжатия показывает устойчивый рост. По завершении сжатия плотность дислокаций в образце № 2 примерно в 5–6 раз выше, чем в образце № 1 (рис. 1, *b*).

Для определения степени активности систем скольжения в кристаллах при механическом нагружении часто используется коэффициент сдвига, максимальное значение которого составляет 1 [10]. Чем выше значение коэффициента сдвига у системы, тем выше вероятность активации ее скольжения. Согласно данным работы [7], у образца № 2 имеются две системы скольжения с высоким коэффициентом сдвига 0.82, в то время как образец № 1 имеет восемь систем скольжения с низким коэффициентом сдвига 0.41. Наличие в образце № 2 наибольшего количества активированных систем скольжения, а также самые большие коэффициенты сдвига приводят к наибольшей деформации сдвига. Поскольку в процессе нагружения разные области испытывают разную деформацию, они активируют разные системы скольжения, что в свою очередь вызывает вращение решетки в разных направлениях. Сильная деформация ведет к образованию двойников, взаимодействие которых с дислокациями усиливает фрагментацию зерен.

Анализ структуры деформируемых образцов показал, что образец № 2 более склонен к образованию деформационных двойников, что согласуется с экспериментальными результатами [11]. Деформационные двойники препятствовали динамическому восстановлению структуры и способствовали ее упрочнению. Зародившиеся дислокации имели тенденцию стекать и накапливаться на деформационных двойниках, формируя дислокационные стенки. В процессе второго сжатия дислокационная плотность в образце № 2 существенно перераспределялась: в целом по всему объему образца она уменьшалась, однако в области дислокационных стенок, наоборот, достаточно быстро возрастала. Взаимодействие между

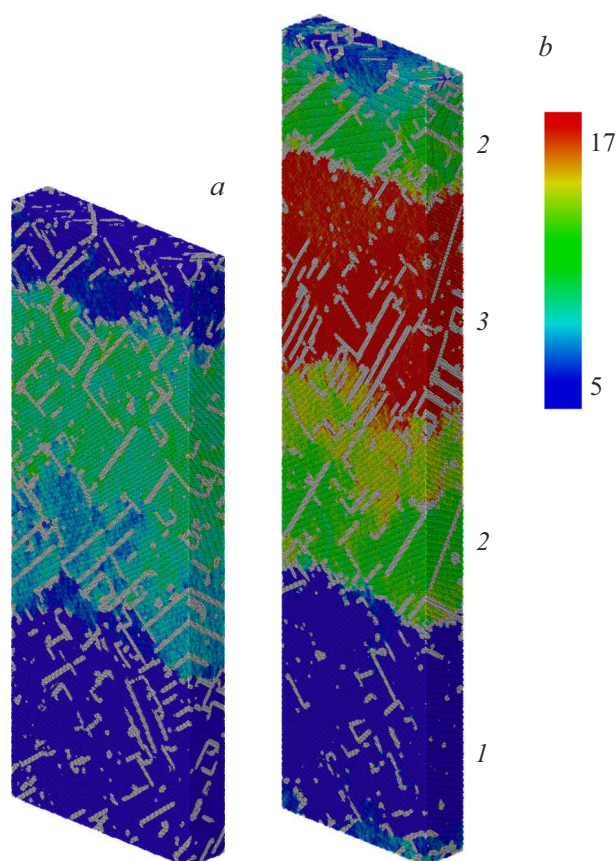


Рис. 2. Фрагментированная структура образца № 2 при втором сжатии на 3.5 (a) и 6.3 % (b). Цветом показаны углы разориентации, серым отмечены атомы, составляющие дефекты структуры. Цифры соответствуют пикам на рис. 3.

деформационными двойниками и накапливающимися на них дислокациями вело к росту разориентации областей по обе стороны двойника и ускоряло процесс фрагментации микроструктуры. Расчеты показали, что фрагментация структуры образца № 2 начиналась при сжатии во втором направлении в интервале деформации от 2 до 7%. При этом фрагменты образца, расположенные между дислокационными стенками, начинали разворачиваться друг относительно друга. Обнаружено, что сначала образец № 2 распадался на два фрагмента (рис. 2, a), по мере увеличения сжатия появлялись новые дислокационные стенки, и количество фрагментов увеличивалось до четырех (рис. 2, b). Следует отметить, что угол разориентации между фрагментами достаточно быстро увеличивался с ростом деформации и достигал 20°. Развороты фрагментов имеют дислокационную природу и обусловлены ростом дислокационной плотности в области дислокационных стенок. Поскольку общая плотность дислокаций уменьшалась с одновременным ее локальным увеличением в области формируемых интерфейсов, объемы фрагментов существенно очищались от дислокаций и имели тенденцию к восстановлению идеальной решетки.

На рис. 3 показана гистограмма углов поворота решетки для образца № 2. Профиль гистограммы хорошо согласуется с особенностями фрагментации образца, представленного на рис. 2, b. В частности, пики на гистограмме соответствуют углам поворота фрагментов с теми же номерами (рис. 2, b) относительно исходной решетки. На основании данных гистограммы можно определить, что при сжатии на 6.3% во втором направлении фрагмент 1 образца на рис. 2, b повернулся на 3–5°, фрагмент 2 — на 10–13°, фрагмент 3 — на 17–19°.

Увеличение скорости одноосного сжатия с 5 до 20 м/с показало, что количество формируемых фрагментов в образце уменьшается с четырех до двух (рис. 4). Уменьшение числа фрагментов может быть связано с инерционностью аккомодации микроструктуры при повышении скорости нагружения. Обнаружено, что фрагментация образца носит выраженный стохастический характер, обусловленный тепловыми флуктуациями атомов решетки, которые определяют место и момент времени зарождения дефектов структуры. Поэтому положения дислокационных стенок, углы взаимных разориентаций фрагментов и плотность дефектов в их теле могут варьироваться в разных расчетах. Указанные отличия можно видеть на рис. 4, где показаны результаты деформирования одного и того же образца со скоростью сжатия 20 м/с. На рисунке хорошо видно, что изменились не только положения и форма интерфейсов, но и плотности дислокаций в теле фрагментов.

Результаты наших расчетов качественно согласуются с результатами моделирования деформационного поведения монокристаллов Cu с такими же ориентациями относительно направления вдавливания при равноканальном угловом прессовании (РКУ) [5]. В настоящей работе показано, что в процессе РКУ образец с ориентацией нагружения [100] имеет более высокую общую плотность дислокаций и двойников, взаимодействие между которыми приводит к более активной фрагментации,

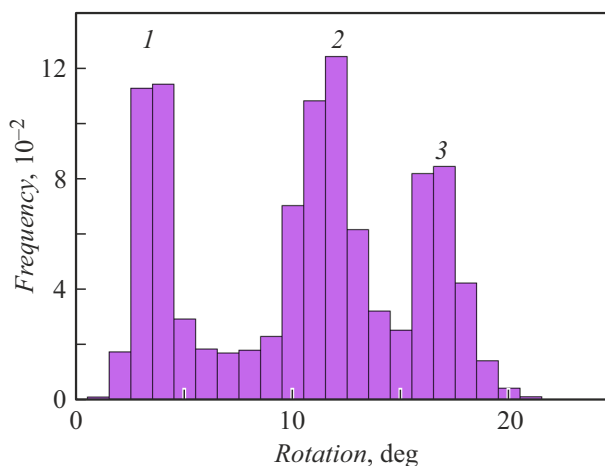


Рис. 3. Гистограмма углов вращения решетки в образце № 2 при сжатии во втором направлении на 6.3 %.

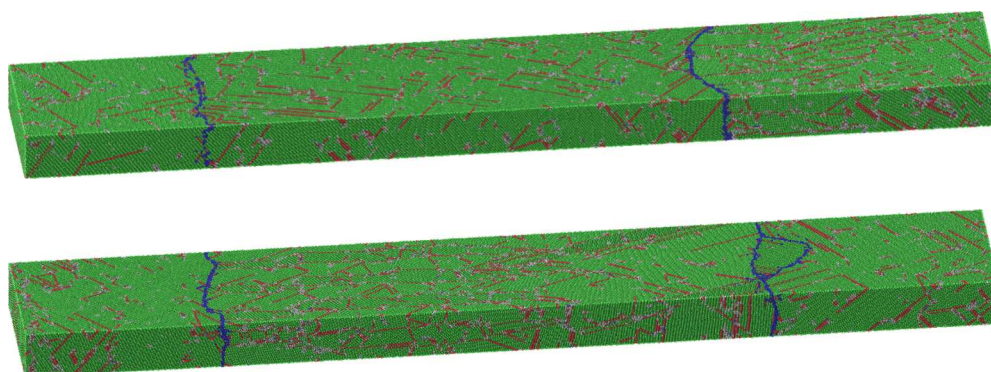


Рис. 4. Структура образца № 2 при сжатии на 10,8% в разных расчетах. Зеленым, красным и серым цветом обозначены атомы с ГЦК-, ГПУ- и неопределенной симметрией ближайшего окружения, синим цветом показаны границы между фрагментами структуры.

чем в случае образца с ориентацией нагружения [110]. Согласно экспериментальным данным работы [12], для получения ультрамелкозернистой структуры рекомендуется выбирать металлы, склонные к двойникованию, и скорость пластической деформации должна превышать 10^5 s^{-1} .

Полученные результаты показали, что начальная ориентация монокристалла меди оказывает существенное влияние на интенсивность генерации дислокаций, особенности распределения плотности дислокаций в объеме и возможность фрагментации в процессе двухстороннейковки. Плотность дислокаций в теле фрагментов в процессе нагружения понижается, а в области интерфейсов увеличивается. Была установлена взаимосвязь между фрагментацией образца и максимальным значением коэффициента сдвига, а также количеством активных систем скольжения. Фрагментация структуры образца № 2 при двухсторонней ковке хорошо согласуется с приведенным выше анализом взаимосвязей соответствующих параметров материала.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН (тема FWRW-2026-0003).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] I. Sabirov, M.Y. Murashkin, R.Z. Valiev, *Mater. Sci. Eng. A*, **560**, 1 (2013). DOI: 10.1016/j.msea.2012.09.020
- [2] I.J. Beyerlein, L.S. Toth, *Prog. Mater. Sci.*, **54**, 427 (2009). DOI: 10.1016/j.pmatsci.2009.01.001
- [3] G.A. Manjunath, S. Shivakumar, F. Russell, R. Nikhil, P.C. Sharath, *Mater. Today Proc.*, **47** (10), 2565 (2021). DOI: 10.1016/j.matpr.2021.05.056

- [4] A.V. Korchuganov, K.P. Zolnikov, D.S. Kryzhevich, *Mater. Lett.*, **252**, 194 (2019). DOI: 10.1016/j.matlet.2019.05.110
- [5] P. Yang, H. Zhang, T. Luan, Y. Jin, *AIP Adv.*, **15**, 015110 (2025). DOI: 10.1063/5.0218101
- [6] S. Plimpton, *J. Comput. Phys.*, **117**, 1 (1995). DOI: 10.1006/jcph.1995.1039
- [7] X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley, *Phys. Rev. B*, **69** (14), 144133 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113
- [8] P.M. Larsen, S. Schmidt, J. Schiøtz, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, **24**, 055007 (2016). DOI: 10.1088/0965-0393/24/5/055007
- [9] A. Stukowski, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, **18** (1), 015012 (2010). DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012
- [10] J. Syarif, A. Altoyuri, I.F. Mohamed, *J. Mater. Res. Technol.*, **17**, 888 (2022). DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.01.061
- [11] W. Han, S. Wu, C. Huang, S. Li, Z. Zhang, *Adv. Eng. Mater.*, **10**, 1110 (2008). DOI: 10.1002/adem.200800131
- [12] V.V. Rybin, N.Yu. Zolotarevskii, E.A. Ushanova, *Phys. Met. Metallogr.*, **116**, 730 (2015). DOI: 10.1134/S0031918X1507011X