УДК 548.4; 539.3

DOI: 10.17223/00213411/63/11/17

*К.П. ЗОЛЬНИКОВ, Д.С. КРЫЖЕВИЧ, А.В. КОРЧУГАНОВ***ЗАРОЖДЕНИЕ И РАЗВИТИЕ ПЛАСТИЧНОСТИ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ОЦК-ЖЕЛЕЗЕ ПРИ СДВИГОВОМ НАГРУЖЕНИИ ***

Изучены особенности зарождения и развития пластичности в нанокристаллическом железе с ОЦК-решеткой при сдвиге. Выявлены механизмы пластической деформации, играющие основную роль в развитии структурных перестроек в процессе нагружения. Показано, что развитие пластичности может быть условно разделено на несколько этапов. Первый этап развития пластичности связан с формированием и распространением дислокаций и двойников. На втором этапе основной вклад в пластическую деформацию начинает вносить внутрзеренное скольжение и межзеренное проскальзывание. Эти процессы инициируют изменение формы зерен. При больших величинах сдвига деформационное поведение образца определяется миграцией границ раздела. Мигрируют не только межзеренные, но и двойниковые границы. В результате миграционных процессов происходит укрупнение зеренной структуры нанокристаллического образца.

Ключевые слова: дефекты структуры, дислокация, двойникование, пластическая деформация, атомные механизмы пластичности, межзеренное проскальзывание, миграция границ зерен, молекулярная динамика.

Введение

Нанокристаллические металлические материалы находят широкое применение в технике. Повышенный интерес к ним вызван их уникальными свойствами, которыми они обладают вследствие малых размеров зерен [1, 2]. Их функциональные и конструкционные возможности еще далеко не исчерпаны. Этот факт стимулирует исследование атомных механизмов, определяющих особенности поведения указанных материалов при механическом нагружении. Зарождение пластической деформации в металлах и сплавах с крупнозеренной структурой, как правило, происходит в результате формирования дислокаций [3]. Однако в нанокристаллических металлах дислокационная подвижность существенно подавлена. Это связано с малыми размерами зерен и высокой плотностью границ раздела. В процессе развития пластической деформации активно включаются недислокационные механизмы. Наиболее важную роль среди этих механизмов играют межзеренное проскальзывание [4–6], миграция границ зерен [7–14] и напряженно-стимулированный рост зерен [15], повороты зерен [16], двойникование [17–19]. Как правило, эти механизмы действуют совместно, компенсируют или активируют друг друга [2].

Наиболее типичными структурными изменениями при нагружении нанокристаллических материалов являются процессы рекристаллизации. Теоретические и экспериментальные исследования показывают, что укрупнение зеренной структуры происходит в результате миграции границ зерен [8–14]. При этом, зернограничная миграция может быть вызвана сдвиговыми модами деформации и/или термической диффузией [20, 21]. Миграция границ зерен достаточно подробно исследована в бикристаллах [8–10]. Было обнаружено, что миграция симметричных наклонных границ зерен по направлению нормали к их плоскостям обычно сопровождается скольжением зерен в тангенциальном направлении [10]. В работах [8, 9] показано, что симметричные наклонные границы зерен в бикристаллах ванадия при сдвиговой нагрузке мигрируют с высокой скоростью. Скорость границ зерен зависит от структуры самой границы и от скорости приложенного сдвига. При этом скорость миграции может варьироваться в широких пределах и достигать нескольких сотен метров в секунду. Движение границ зерен является скачкообразным. Периодическое повышение и понижение напряжения обусловлено кристаллическостью бикристалла и симметричностью границ зерен. Было установлено, что движение границы представляет последовательность специфических перестроек атомных плоскостей, прилегающих к границе зерна. В результате прилегающие плоскости одного зерна подстраиваются под структуру соседнего растущего зерна. Несмотря на высокое напряжение, периодически возникающее в процессе миграции, дефекты структуры в бикристалле не зарождались. Однако механизмы миграции границ зерен в бикристалле су-

* Работа выполнена в рамках госзадания ИФПМ СО РАН, проект III.23.1.4.

существенно отличаются от соответствующих механизмов в нанокристаллическом материале. Причиной отличия служит высокая плотность тройных стыков зерен, что приводит к торможению миграционного движения. В нанокристаллических материалах миграционное смещение по нормали неоднородно вдоль границы зерен [22]. Кроме того, зарождение и распространение дислокаций изменяет распределение напряжений в зернах, а их выход в границы зерен изменяет элементарные структурные единицы зернограничной области [22, 23]. Вышеперечисленные процессы угнетают миграционное движение. В работе [24] в рамках молекулярно-динамического моделирования были исследованы механизмы зернограничной деформации в нанокристаллическом Al при одноосном нагружении. Пластическая деформация в материале реализовывалась посредством миграции границ зерен и зарождения в области границ зерен дислокаций и двойников. Границы зерен оказывали наибольшее влияние на деформационное поведение нанокристаллического образца. Ввиду скоротечности процессов и малых пространственных масштабов изучение пластичности в материалах экспериментальными методами встречает существенные трудности. Особенности зарождения и развития структурных перестроек в материалах при механическом нагружении могут быть эффективно исследованы на основе компьютерного моделирования [25–28]. Корректное атомистическое моделирование позволяет предоставить подробную информацию и предсказать деформационное поведение нанокристаллических материалов.

В настоящей работе изучена последовательность активации различных механизмов и особенностей их взаимодействия друг с другом в зарождении и развитии пластической деформации в нанокристаллическом железе с ОЦК-решеткой при сдвиговом нагружении. Для реалистичного описания моделированных образцов использовались стесненные условия, которые адекватно имитировали поведение зерен под нагрузкой в объеме материала.

Методы расчета и анализа

Моделирование проводилось на основе метода молекулярной динамики, который явным образом учитывает атомную структуру и позволяет исследовать отклик материала в условиях высокоэнергетических воздействий [29–32]. Межатомное взаимодействие в железе описывалось многочастичным потенциалом, разработанным в рамках приближения Финниса-Синклера [33]. Нагружаемый образец состоял из 36 зерен с размером 10 нм. Зеренная структура образца была построена на основе алгоритма Вороного с центрами зерен в узлах условной ОЦК-решетки с параметром 10.6 нм. Размеры образца в направлениях x , y , z составляли $31.8 \times 31.8 \times 21.2$ нм. В направлении сдвига x укладывалось 6 слоев зерен, в направлении z – 4 слоя зерен. В этих направлениях задавались периодические граничные условия. В направлении z баростат поддерживал нулевое напряжение. В направлении нормали к захватам y укладывалось 7 слоев зерен. Захваты представляли собой жесткие тела, которые смещались с постоянной скоростью 0.8 м/с в противоположные стороны. Для имитации поведения зерен в объеме материала в стесненных условиях в направлении y на захваты действовали силы, направленные в объем образца. Эти силы поддерживали в образце сжимающее напряжение 100 МПа. Начальная температура образца задавалась равной 300 К. Шаг интегрирования составлял 5 фс. Для идентификации структурных изменений в нагружаемых образцах был использован анализ по общим соседям [34] и алгоритм выявления дислокаций [35]. Для визуализации структуры использовался пакет OVITO [36]. Моделирование деформационного поведения нанокристаллического материала проводилось с использованием вычислительного пакета LAMMPS [37].

Результаты и их обсуждение

Результаты моделирования показали, что процесс развития пластичности в нанокристаллическом образце железа может быть условно разделен на несколько этапов. Каждый этап характеризуется определенным механизмом или совокупностью механизмов пластичности. Зарождение различных дефектов структуры и структурных изменений в нанокристаллическом материале хорошо коррелирует с изменением действующих напряжений. Так, формирование и распространение любых дефектов всегда ведет к замедлению роста или уменьшению напряжений.

На первом этапе развития пластической деформации в образце формируются дислокации и двойники. На рис. 1 на примере фрагмента структуры моделируемого образца в различные моменты времени показан процесс эволюции двойника. Отметим, что двойник зародился в области тройного стыка. Он распространяется в объем зерна до тех пор, пока не достигнет границы с со-

седним зерном. В области контакта двойника с границей зерен, как правило, генерируется новый двойник или дислокация, которые будут распространяться в объем соседнего зерна. Зарождение и распространение дислокации в одном из зерен показаны на рис. 2. Вследствие малого размера зерен дислокации достаточно быстро уходят в границы. В условиях нарастающей деформации дислокационного механизма и двойникового становится недостаточно для аккомодации структуры. Однако зарождение и скольжение дислокаций в образце наблюдалось также и на последующих этапах. Отметим, что дислокации и двойники не только вносили свой вклад в эволюцию структуры при деформировании образца, но и инициировали другие механизмы пластичности. Так, сформировавшиеся двойниковые границы представляли собой области для облегченного зарождения и скольжения новых двойникующих дислокаций и роста толщины двойников. При этом первоначально формирование двойников проходило в тех зернах, ориентация плоскостей двойникового которых была близка к ориентации плоскости сдвига захватов xz .

Рис. 1. Двойник в различные моменты времени в одном из зерен на первом этапе развития пластичности: 0 (а), 5 (б) и 80 пс (в). Линиями показано положение межзеренных границ на срезе структуры, темно-серым цветом – атомы двойниковой границы, серым цветом – атомы, принадлежащие границам зерен. Атомы с ОЦК-симметрией ближайшего окружения не показаны

Рис. 2. Дислокация в различные моменты времени в одном из зерен на первом этапе развития пластичности: 0 (а), 10 (б) и 50 пс (в). Линиями показано положение межзеренных границ на срезе структуры, темно-серым цветом – дислокация, серым цветом – атомы, принадлежащие границам зерен. Атомы с ОЦК-симметрией ближайшего окружения не показаны

На следующем этапе вследствие локализации деформации включается внутризеренное скольжение и межзеренное проскальзывание. В [12–14] было отмечено, что межзеренное проскальзывание является основным механизмом в развитии пластичности в нанокристаллическом материале. Характерное смещение границ зерен, обусловленное сдвиговой нагрузкой, представлено на рис. 3. Для большей наглядности, темно-серым цветом были выделены атомы, которые в исходной структуре образовывали вертикальные линии. Хорошо видно, что зерна сместились друг относительно друга. При этом наибольшие смещения произошли в направлении сдвигового нагружения. Структурные перестройки на рис. 3 являются результатом совместного воздействия внутризеренного скольжения и межзеренного проскальзывания. Так, центральное зерно с сечением в форме ромба деформируется в результате распространения дислокаций и двойников, а нижние зерна проскальзывают по границе с верхними зернами.

Рис. 3. Внутризеренное скольжение и межзеренное проскальзывание. Положение зерен в различные моменты времени: 0 (а), 2 (б) и 3 нс (в). Черным и серым цветом обозначены атомы с неопределенной и ОЦК-симметрией ближайшего окружения соответственно. Темно-серым цветом отмечены атомы, изначально расположенные в вертикальных рядах

При дальнейшем нагружении изменение формы зерен становится более выраженным. Этот процесс обусловлен взаимодействием дислокаций и двойников с границами зерен. Пример изменения формы зерен представлена на рис. 4. Особенности формоизменения центрального зерна на рис. 4 определяются формирующимися дефектами и кристаллографической ориентацией окружающих зерен друг относительно друга и относительно направления нагружения. Поэтому изменения формы зерен даже из одного слоя, параллельного захвату, существенно различаются.

Рис. 4. Форма зерен в различные моменты времени: 0 (а), 4 (б) и 7 нс (в). Разными оттенками обозначены атомы, изначально принадлежащие разным зернам. Черным отмечены атомы с неопределенной симметрией ближайшего окружения

При дальнейшем нагружении изменения формы зерен становится недостаточно для аккомодации структуры материала, поэтому в процесс пластичности включается миграция границ зерен. Положение границ зерен в различные моменты времени при миграционном движении представлено на рис. 5, а, б. Видно, что нормальное смещение неоднородно вдоль границы зерен. Взаимодействие дислокаций с границами зерен изменяет их структуру и влияет на миграцию границ. Следует отметить, что высокая плотность тройных стыков в нанокристаллическом материале существенно тормозит распространение границ и искажает фронт их распространения. Миграция границ зерен значительно изменяет внутреннюю структуру образца. Так, в результате миграции межзеренных границ и переориентации структуры соседних зерен, обусловленной зарождением и движением двойников и дислокаций, происходит укрупнение зеренной структуры нанокристаллического образца (рис. 5, в).

Рис. 5. Положения границ зерен в различные моменты времени: 0 (а), 5 (б) и 7 нс (в). Разными оттенками обозначены атомы, первоначально принадлежащие разным зернам. Черным отмечены атомы с неопределенной симметрией ближайшего окружения. Линиями показана ориентация атомных рядов

Несмотря на стесненные условия, сдвиговое нагружение может привести к формированию нанопор в образце. Нанопора всегда образуется в области тройного стыка, в окрестности которого соседние зерна смещались в противоположных направлениях. Такое смещение обусловлено существенной неоднородностью распределения внутреннего напряжения, а также высоким градиентом напряжения в области стыка. На рис. 6 показан момент зарождения нанопоры и момент, когда она достигла размера ~ 2 нм. Нанопора имеет вытянутую в направлении сдвига форму. Результаты моделирования согласуются с экспериментальными *in situ* наблюдениями зарождения поры в пленке меди в области тройного стыка границ зерен и двойниковой границы [38].

Рис. 6. Нанопора в различные моменты времени: 9 (а) и 12 нс (б). Черным и серым цветом обозначены атомы с неопределенной и ОЦК-симметрией ближайшего окружения соответственно

Развитие пластической деформации существенно неоднородно в объеме моделируемого образца. Прежде всего, это связано с малым числом зерен в образце. Ориентация зерен относительно направления сдвига во многом определяла те зерна и границы зерен, в которых будут инициированы процессы структурных изменений. Кроме того, на процессы пластичности значительное влияние оказала удаленность зерен от захватов, к которым прикладывалось сдвиговое нагружение.

Заключение

Результаты молекулярно-динамического моделирования показали, что развитие пластической деформации в нанокристаллическом железе можно условно разделить на этапы в зависимости от величины деформации. Каждый этап означает активацию нового механизма или совокупность механизмов пластичности. Зарождение пластической деформации в образце реализуется посредством формирования дислокаций и двойников. Вследствие малого размера зерен дислокации достаточно быстро уходят на границы зерен. Первый этап развития пластичности заканчивается, когда дислокационный механизм становится недостаточно для аккомодации структуры образца в условиях нарастающего сдвигового нагружения. Значительную роль в локализации деформации играют двойники. Границы двойников являются областями, которые способствуют зарождению и распространению двойникующих дислокаций, а также росту толщины двойников. Когда сдвиги, вызванные двойниками, достигают границ с соседними зернами, они генерируют в них дислокации или двойники. На этом этапе наибольший вклад в развитие пластичности материала вносит внутризеренное скольжение и межзеренное проскальзывание. При росте сдвигового нагружения в результате внутризеренного скольжения происходит изменение формы зерен без изменения их размера. На последнем этапе, когда перечисленные механизмы исчерпали свои возможности аккомодации материала, в развитие пластической деформации включается механизм миграции границ зерен. На этом этапе усиливается миграция двойниковых границ в зернах. Миграционные процессы неизбежно ведут к укрупнению одних зерен за счет других. Несмотря на стесненные условия нагружения, в областях тройного стыка могут формироваться нанопоры. Они образуются в результате возникновения растягивающих напряжений в тройных стыках, которые возникают вследствие разнонаправленных смещений соседних зерен. Такой характер смещения зерен обусловлен высокой степенью локализации деформации в нанокристаллическом материале.

Необходимо отметить, что деформационное поведение наноразмерных поликристаллов с малым числом зерен существенно зависит от ориентации отдельных зерен относительно направления нагружения. Зарождение и развитие пластичности всегда начинается в зернах, в которых ориентация систем двойникового совпадает или близка к плоскости и направлению сдвигового нагружения. Поэтому вплоть до больших деформаций пластичность может реализоваться только в таких зернах и на их границах. Это ведет к существенно неоднородному распределению пластичности в объеме деформированного образца.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Koch C.C. // *J. Mater. Sci.* – 2007. – V. 42(5). – P. 1403–1414.
2. Ovid'ko I.A., Valiev R.Z., and Zhu Y.T. // *Prog. Mater. Sci.* – 2018. – V. 94. – P. 462–540.
3. Conrad H. // *Metall. Mater. Trans. A. Phys. Metall. Mater. Sci.* – 2004. – V. 35 A(9). – P. 2681–2695.
4. Li Q., Wang L., Teng J., et al. // *Scr. Mater.* – 2020. – V. 180. – P. 97–102.
5. Ovid'ko I.A. // *J. Mater. Sci.* – 2007. – V. 42(5). – P. 1694–1708.
6. Bondar M.P., Psakhie S.G., Dmitriev A.I., et al. // *Phys. Mesomech.* – 2013. – V. 16(3). – P. 191–199.
7. Zhou X., Li X., and Lu K. // *Phys. Rev. Lett.* – 2019. – V. 122(12). – P. 126101.
8. Kryzhevich D.S., Zolnikov K.P., and Korchuganov A.V. // *Comput. Mater. Sci.* – 2018. – V. 153. – P. 445–448.
9. Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., and Korchuganov A.V. // *Lett. Mater.* – 2019. – V. 9(2). – P. 197–201.
10. Cahn J.W., Mishin Y., and Suzuki A. // *Acta Mater.* – 2006. – V. 54(19). – P. 4953–4975.
11. Molodov D.A., Ivanov V.A., and Gottstein G. // *Acta Mater.* – 2007. – V. 55(5). – P. 1843–1848.
12. Bobylev S.V. and Ovid'ko I.A. // *Acta Mater.* – 2015. – V. 88. – P. 260–270.
13. Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G., and Aifantis E.C. // *Acta Mater.* – 2011. – V. 59(12). – P. 5023–5031.
14. Bobylev S.V., Morozov N.F., and Ovid'ko I.A. // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – V. 105(5). – P. 055504.
15. Zhang Y., Tucker G.J., and Trelewicz J.R. // *Acta Mater.* – 2017. – V. 131. – P. 39–47.
16. Dmitriev A.I., Nikonov A.Y., Shugurov A.R., et al. // *Appl. Surf. Sci.* – 2019. – V. 471. – P. 318–327.
17. Hahn E.N. and Meyers M.A. // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2015. – V. 646. – P. 101–134.
18. Литовченко И.Ю., Тюменцев А.Н. // *Изв. вузов. Физика.* – 2019. – Т. 62. – № 5. – С. 142–148.
19. Wang Y.M., Hodge A.M., Biener J., et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – V. 86(10). – P. 1–3.
20. Rupert T.J., Gianola D.S., Gan Y., et al. // *Science.* – 2009. – V. 326(5960). – P. 1686–1690.
21. Zhang L., Lu C., and Shibuta Y. // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2018. – V. 26(3). – P. 035008.
22. Wang P., Yang X., and Peng D. // *Comput. Mater. Sci.* – 2016. – V. 112. – P. 289–296.
23. Velasco M., Van Swygenhoven H., and Brandl C. // *Scr. Mater.* – 2011. – V. 65(2). – P. 151–154.
24. Zhang L., Shibuta Y., Huang X., et al. // *Comput. Mater. Sci.* – 2019. – V. 156. – P. 421–433.
25. Dmitriev A.I., Smolin A.Y., Psakhie S.G., et al. // *Phys. Mesomech.* – 2008. – V. 11(1–2). – P. 73–84.
26. Smolin A.Y., Eremina G.M., Sergeev V.V., et al. // *Phys. Mesomech.* – 2014. – V. 17(4). – P. 292–303.
27. Tarasov S.Y., Chumaevskii A.V., Lychagin D.V., et al. // *Wear.* – 2018. – V. 410–411. – P. 210–221.
28. Eremina G.M. and Smolin A.Y. // *Facta Univ. Ser. Mech. Eng.* – 2019. – V. 17(1). – P. 29–38.
29. Shugurov A., Panin A., Dmitriev A., et al. // *Wear.* – 2018. – V. 408–409. – P. 214–221.
30. Zolnikov K.P., Korchuganov A.V., Kryzhevich D.S., et al. // *Phys. Mesomech.* – 2019. – V. 22(5). – P. 355–364.
31. Zolnikov K.P., Korchuganov A.V., Kryzhevich D.S., et al. // *Phys. Mesomech.* – 2018. – V. 21(6). – P. 492–497.
32. Korchuganov A.V., Zolnikov K.P., and Kryzhevich D.S. // *Mater. Lett.* – 2019. – V. 252. – P. 194–197.
33. Malerba L., Marinica M.C., Anento N., et al. // *J. Nucl. Mater.* – 2010. – V. 406(1). – P. 19–38.
34. Honeycutt J.D. and Andersen H.C. // *J. Phys. Chem.* – 1987. – V. 91(19). – P. 4950–4963.
35. Stukowski A. and Albe K. // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2010. – V. 18(8). – P. 085001.
36. Stukowski A. // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2010. – V. 18(1). – P. 015012.
37. Plimpton S. // *J. Comput. Phys.* – 1995. – V. 117(1). – P. 1–19.
38. Kou Z., Yang Y., Yang L., et al. // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2018. – V. 737. – P. 336–340.

Поступила в редакцию 12.02.2020.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

Зольников Константин Петрович, д.ф.-м.н., гл. науч. сотр. ИФПМ СО РАН, e-mail: kost@ispms.ru;

Крыжевич Дмитрий Сергеевич, к.ф.-м.н., науч. сотр. ИФПМ СО РАН, e-mail: kryzhev@ispms.ru;

Корчуганов Александр Вячеславович, к.ф.-м.н., науч. сотр. ИФПМ СО РАН, e-mail: avkor@ispms.ru.