

PACS numbers: 02.70.Ns, 05.65.+b, 61.43.Bn, 61.72.Bb, 61.72.J-, 62.20.Fq, 62.25.Mn, 83.50.Ha

Гідродинамічні моди пластиичної деформації в нанокристалах металів з ГЦК- та ОЦК-гратницями

О. Е. Засимчук, В. І. Засимчук, Т. В. Турчак, О. С. Гащенко, О. І. Баскова

*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна*

В статті за допомогою аналітичних розрахунків та комп’ютерного моделювання розглянута можливість утворення каналів в’язко-пластиичної течії речовини в бездислокаційних нанокристалах з ГЦК- та ОЦК-кристалічними гратницями, що знаходяться в механічному полі. Показано, що атоми, які коливаються в ланцюжках, розташованих в ділянках концентрації напруг, можуть створювати вакансії, що призводить до утворення впорядкованої структури, яка складається з вакансійних дефектів. Така структура може розглядатися як зародки каналів в’язко-пластиичної (гідродинамічної) течії речовини, яка призводить до локалізованої в них пластичної формозміні. Моделювання проводили методом молекулярної динаміки з використанням грід-технології.

Ключові слова: деформація, кристал, вакансія, канали гідродинамічної течії, концентрація напруг, молекулярна динаміка, моделювання.

The capacity of viscous-plastic flow canals origination in dislocation-free nanocrystals with face-centred and cubic-centred crystal lattices, located in mechanical field, is revealed by analytical calculations and computer simulation. As shown, the atoms in chains, located in regions of stress concentration, during vibrations may to create the vacancies. It promotes to formation an ordered structure of vacancy defects. Such structure can be considered as

Corresponding author: E. E. Zasimchuk
E-mail: eezas@imp.kiev.ua

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

Citation: E. E. Zasimchuk, V. I. Zasimchuk, T. V. Turchak, O. S. Gatsenko, and O. I. Baskova, Hydrodynamic Modes of Plastic Deformation in F.C.C. and B.C.C. Metal Nanocrystals, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **42**, No. 2: 281–288 (2020) (in Ukrainian), DOI: [10.15407/mfint.42.02.0281](https://doi.org/10.15407/mfint.42.02.0281).

nucleus of hydrodynamic flow canals, which leads to localization of plastic deformation in them. Modelling is carried out by the molecular dynamics method using grid-technology.

Key words: deformation, crystal, vacancy, hydrodynamic flow canals, concentration of stresses, molecular dynamics, simulation.

В статье с помощью аналитических расчётов и компьютерного моделирования рассмотрена возможность образования каналов вязко-пластического течения вещества в бездислокационных нанокристаллах с ГЦК- и ОЦК-кристаллическими решётками, находящихся в механическом поле. Показано, что колеблющиеся в цепочках атомы в участках концентрации напряжений могут создавать вакансии, что приводит к образованию упорядоченной структуры, состоящей из вакансационных дефектов. Такая структура может рассматриваться как зародыш каналов вязко-пластического (гидродинамического) течения вещества, приводящего к локализованному в них пластическому формоизменению. Моделирование проводили методом молекулярной динамики с использованием грид-технологии.

Ключевые слова: деформация, кристалл, вакансия, каналы вязко-пластического (гидродинамического) течения, концентрация напряжений, молекулярная динамика, моделирование.

(*Отримано 20 вересня 2019 р.; остаточн. варіант — 16 січня 2020 р.*)

1. ВСТУП

У наших попередніх дослідженнях [1, 2] та ін. ми показали, що при гальмуванні або при повній відсутності дислокаційного ковзання кристалічні метали та стопи, що знаходяться далеко від термодинамічної рівноваги, можуть деформуватися шляхом в'язко-пластичної течії, яка локалізується в каналах з рихлою аморфною структурою. Густота речовини в таких каналах істотно нижче густини вихідного кристала, що дозволило нам представити їх структуру у вигляді кристалічної, яка сильно спотворена вакансіями та вакансійними конгломератами [1, 2]. Проте виникає питання: звідки беруться вакансії, якщо в'язко-пластичній (гідродинамічній) течії не передує дислокаційне ковзання? Ми спробували відповісти на це питання за допомогою моделювання нанозразків методом молекулярної динаміки при впливі на них енергетичними полями з різною інтенсивністю.

Відомий факт, що далеко від термодинамічної рівноваги можливі процеси утворення структури (самоорганізація) системи в енергетичному полі [3–5] та ін. Тобто, цікавим є саме фізичний механізм самоорганізації структури кристалічного матеріалу, що призводить до його пластичної формозміни. Ми змогли показати, що за певних умов може виникати упорядкована структура, що складається з ва-

кансій. Така структура призводить до появи в мікрооб'ємах, так званих атом-вакансійних станів [6]. Останні, в свою чергу, є зародками гідродинамічних каналів, по яких відбувається локалізована в об'ємі в'язко-пластична течія речовини. В даній роботі розглянуто варіант самоорганізації деформованого кристала, та показана можливість гідродинамічної формозміни кристалічного матеріалу без участі дислокацій та інших дефектів кристалічної будови за умов, коли система знаходиться далеко від термодинамічної рівноваги.

Було проведено комп'ютерне моделювання поведінки бездефектних металевих нанокристалів з ГЦК- і ОЦК-кристалічними ґратницями в механічному полі. Моделювання було проведено за допомогою методу молекулярної динаміки, який детально описаний в [7] та застосовано ЕАМ-потенціал [8, 9]. В якості досліджуваного матеріалу були обрані нанокристали золота, розміром $6,4 \times 6 \times 1,6$ нм³ і орієнтацією <010> {010}, а також ванадію, розміром $6,4 \times 6 \times 1,6$ нм³ і орієнтацією <010> {001}. Умови навантаження представляли собою статичне одновісне навантаження до ступеню деформації $\approx 13,5\%$. Для моделювання, а також подальшої обробки результатів та їх візуалізації використовувалося програмне забезпечення LAMMPS і Ovito [10–12].

2. МОДЕЛЮВАННЯ

В якості зразків для дослідження були обрані бездефектні нанокристиали Au і V з ідеальною ґратницею. Для аналізу стану кристалічної ґратниці в процесі моделювання статичної деформації зразка використовувався метод СНА [7]. Суть даного методу полягає в дослідженні взаємного розташування атомів і їх найближчих сусідів, співвідносячи їх з певними типами кристалічних ґратниць. Оскільки основною метою моделювання було дослідження розвитку дефектної субструктури, то для візуалізації результатів вибиралися лише ті атоми, які відносились до дефектів.

На рисунку 1 наведено результат моделювання для нанокристалів золота і ступеня деформації $\approx 3,4\%$. Сірими точками в об'ємі зразка позначено точкові дефекти. Ці точкові дефекти являють собою атом-вакансійні стани або вакансії. Як вже було показано в [7] атом-вакансійні стани в повній мірі володіють властивостями класичних точкових дефектів.

Дефектна субструктура при невеликих ступенях деформації не має конкретної локалізації, тобто дефекти розповсюджені хаотично і рівномірно по всьому об'єму зразка.

При збільшенні ступеня деформації до $\epsilon = 4,7\%$ (рис. 2) дефекти починають займати впорядковане положення та локалізуються у групи. При подальшому збільшенні ступеня деформації до $\epsilon \approx 8\%$ (рис. 3) спостерігається ще більша локалізація дефектів та

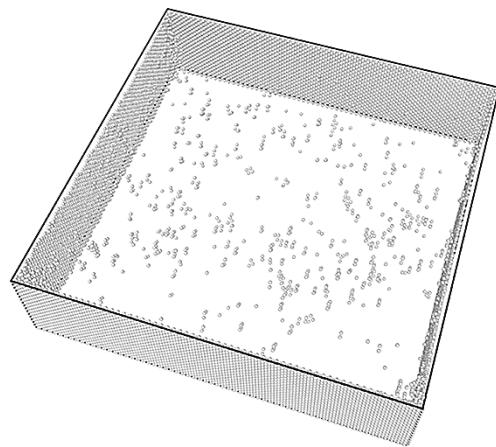


Рис. 1. Розподіл дефектів в об'ємі зразка з Au; орієнтація $<010>\{010\}$; $\varepsilon \approx 3,4\%$.

Fig. 1. Distribution of defects in the volume of the Au sample; orientation $<010>\{010\}$; $\varepsilon \approx 3.4\%$.

розташування їх в місцях найбільшої концентрації напружень.

Скупчення такого роду дефектів у великих кількостях можуть утворювати локальні зони, в яких інтенсифікуються деформаційні процеси, утворюючи канали гідродинамічної течії.

Для дослідження еволюції дефектної субструктурі, окрім якіс-

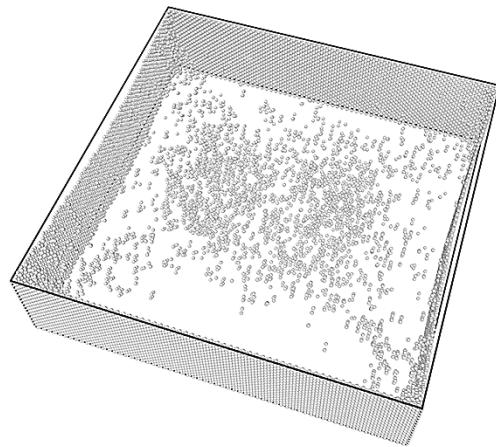


Рис. 2. Розподіл дефектів в об'ємі зразка з Au; орієнтація $<010>\{010\}$; $\varepsilon \approx 4,7\%$.

Fig. 2. Distribution of defects in the volume of the Au sample; orientation $<010>\{010\}$; $\varepsilon \approx 4.7\%$.

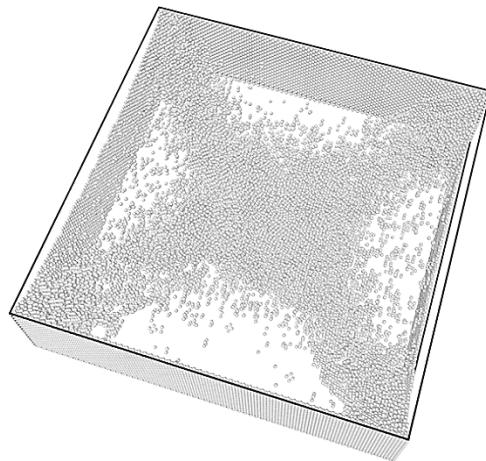


Рис. 3. Розподіл дефектів в об'ємі зразка з Au; орієнтація $<010>\{010\}$; $\varepsilon \approx 8\%$.

Fig. 3. Distribution of defects in the volume of the Au sample; orientation $<010>\{010\}$; $\varepsilon \approx 8\%$.

ного аналізу, використовувався також кількісний аналіз наступних параметрів: значення тиску вздовж головних осей відносно ступеня деформації, мікронапруги, температура тощо.

На рисунку 4 наведено розподіл усереднених по всіх атомах зна-

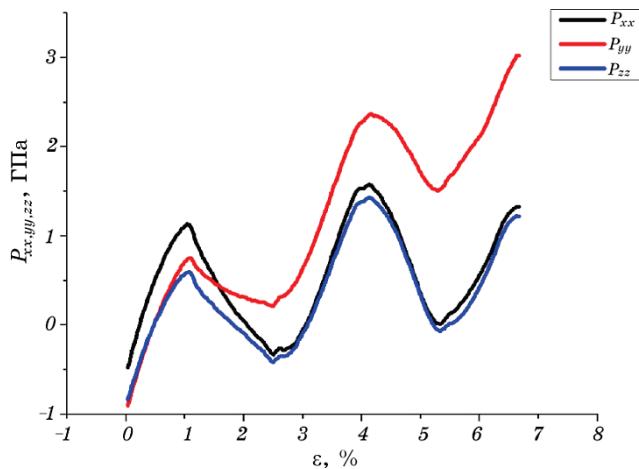


Рис. 4. Розподіл усереднених по всіх атомах значень внутрішнього тиску вздовж головних осей (ГЦК-гратниця).

Fig. 4. Distribution of internal pressure values averaged over all atoms along the principal axes (f.c.c. lattice).

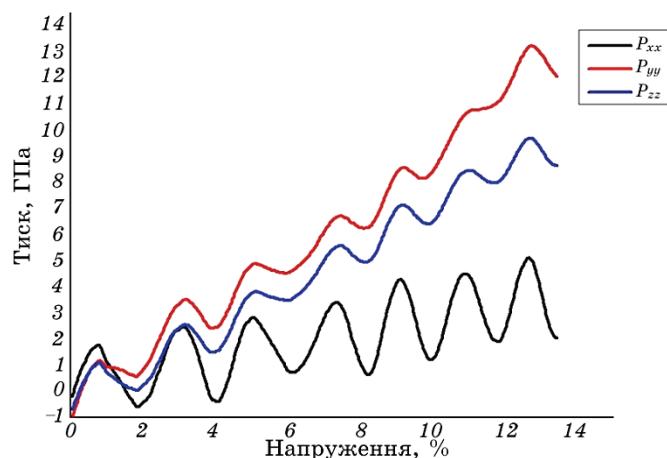


Рис. 5. Розподіл усереднених по всіх атомах значень внутрішнього тиску вздовж головних осей (ОЦК-гратниця).

Fig. 5. Distribution of internal pressure values averaged over all atoms along the principal axes (b.c.c. lattice).

чені внутрішнього тиску в модельованих нанокристалах вздовж головних осей. Зміни значень тиску описують зміни напружень, які виникають в нанокристалі під час навантаження. Можна відзначити різкі зміни значень тиску, що говорить про «стадійність» процесу деформації за рахунок еволюції ансамблю точкових дефектів. Зміцнення зразка змінюється поступовим знеміцненням і знову по- дальшим зростанням мікронапруг. Зміни можуть свідчити про зміну характеру еволюції дефектних утворень.

Початкове зростання тиску можна пояснити пружною деформацією кристалічної гратниці, коли після досягнення першого максимуму відбувається релаксація внаслідок утворення точкових дефектів, хаотично розташованих в об'ємі нанокристалу, що призводить до зменшення усереднених напруг. Зі збільшенням ступеню деформації значення тиску зростають до нового максимуму, окремі хаотично розташовані дефекти локалізуються в місцях найбільших концентрацій напруг (по діагоналях нанокристалів та на їх перетині), що призводить до загальної релаксації системи. Негативні значення, що виникають на початкових стадіях деформування, пояснюються процесами врівноваження, які відбуваються на етапі початкової термалізації до кімнатної температури. Аналогічні дослідження також проводилися для зразків з ОЦК-гратницею (ванадій).

Зразки з ОЦК-гратницею (рис. 5) демонструють подібну поведінку, що свідчить про одинаковий механізм розвитку деформації та еволюції структури незважаючи на різні типи кристалічних гратниць.

3. ВИСНОВКИ

У статті запропоновано механізм утворення каналів в'язко-пластичної течії кристалічного матеріалу при відсутності в початковому стані дефектів кристалічної будови. За допомогою методу молекулярної динаміки показано, що в матеріалі, який знаходиться під дією зовнішнього механічного поля, атоми в ділянках концентрації напружень, можуть утворювати точкові дефекти (атом-вакансійні стани [6]) і при деяких умовах може виникати локально-упорядкована структура, що складається з дефектів. Подальша еволюція даної структури в свою чергу, може бути зародком гідродинамічних каналів, по яких відбувається локалізований в об'ємі в'язко-пластична течія речовини. Отже, вакансійні дефекти кристалічної будови можуть зароджуватися і розмножуватися, утворюючи ділянки в'язко-пластичної течії кристалічного матеріалу, не тільки за допомогою дислокацій, а й при відсутності останніх.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Е. Э. Засимчук, В. И. Засимчук, Т. В. Турчак, *Успехи физ. мет.*, **14**: 275 (2013).
2. E. Zasimchuk, O. Baskova, O. Gatsenko, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Performance*, **27**, No. 8: 4183 (2018).
3. Г. Ніколіс, І. Пригожин, *Самоорганізація в неравновесних системах* (Ред. Ю. А. Чизмаджев) (Москва: Мир: 1979).
4. Г. Хакен, *Синергетика* (Москва: Мир: 1980).
5. В. Эбелинг, *Образование структур при необратимых процессах* (Москва: Мир: 1979).
6. В. Е. Панин, В. Е. Егорушкин, Ю. А. Хон, Т. Ф. Елсукова, *Изв. вузов. Физика*, **25**, № 12: 5 (1982).
7. О. С. Гаценко, О. Е. Засимчук, П. О. Теселько, С. Г. Стіренко, Ю. Г. Гордієнко, *Металлофіз. новітні та технології*, **36**, № 9: 1207 (2014).
8. M. Daw and M. Baskes, *Phys. Rev. B*, **29**: 6443 (1984).
9. M. Finnis, *Interatomic Forces in Condensed Matter* (Oxford: Oxford Univ. Press: 2003).
10. S. Plimpton, *J. Comp. Phys.*, **117**, No. 1: 1 (1995).
11. K. Jacobsen, J. Norskov, and M. Puska, *Phys. Rev. B*, **35**: 7423 (1987).
12. A. Stukowski, *Mod. Sim. Mater. Sci. Eng.*, **18**, No. 1: 0965 (2010).

REFERENCES

1. E. E. Zasimchuk, V. I. Zasimchuk, and T. V. Turchak, *Usp. Fiz. Met.*, **14**, No. 3: 275 (2013) (in Russian).
2. E. Zasimchuk, O. Baskova, O. Gatsenko, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Performance*, **27**, No. 8: 4183 (2018).
3. G. Nicolis and I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems. From*

- Dissipative Structures to Order Through Fluctuations* (New York: Wiley: 1977).
- 4. H. Haken, *Synergetics* (Berlin: Springer: 1980).
 - 5. W. Ebeling, *Obrazovanie Struktur pri Neobratimykh Protsessakh* (Moscow: Mir: 1979) (in Russian).
 - 6. V. E. Panin, V. E. Yegorushkin, Yu. A. Hon, and T. F. Yelsukova, *Izvestiya Vuzov. Fizika*, **25**, No. 12: 5 (1982) (in Russian).
 - 7. A. S. Gatsenko, O. E. Zasimchuk, P. O. Teselko, S. G. Stirenko, and Yu. G. Gordienko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 9: 1207 (2014) (in Ukrainian).
 - 8. M. Daw and M. Baskes, *Phys. Rev. B*, **29**: 6443 (1984).
 - 9. M. Finnis, *Interatomic Forces in Condensed Matter* (Oxford: Oxford Univ. Press: 2003).
 - 10. S. Plimpton, *J. Comp. Phys.*, **117**, No. 1: 1 (1995).
 - 11. K. Jacobsen, J. Norskov, and M. Puska, *Phys. Rev. B*, **35**: 7423 (1987).
 - 12. A. Stukowski, *Mod. Sim. Mater. Sci. Eng.*, **18**, No. 1: 0965 (2010).