

*A.V. Bolest, V.M. Fomin***Моделирование поведения поликристаллической меди в условиях квазистатического нагружения методом молекулярной динамики***A.V. Bolest, V.M. Fomin***Simulation of Polycrystalline Copper Quasistatic Loading by Molecular Dynamics Method**

Предложена методика молекулярно-динамического моделирования поликристаллической меди. Для формирования начальных данных атомы размещались в расчетной ячейке в соответствии с гранецентрированной кубической решеткой. Затем полученная система разогревалась выше точки плавления, поддерживая давление, равным атмосферному. Полученный расплав резко охлаждался при атмосферном давлении до температуры от 400 до 1200 К, после чего в процессе эволюции системы при постоянной температуре в ней происходит гомогенная нуклеация кристаллитов меди, которые растут в течение нескольких десятков наносекунд, формируя поликристалл. На основе результатов молекулярно-динамического исследования процессов одноосного квазистатического деформирования полученных нанокристаллов показано, что с уменьшением размера зерна от 14 до 6 нм предел текучести растет в соответствии с законом Холла-Петча, а затем, при меньшем размере зерна, убывает вследствие смены микроскопического механизма деформирования. Модуль Юнга убывает в нанокристаллической меди с размером зерна менее 10 нм.

Ключевые слова: молекулярная динамика, поликристалл, одноосная деформация.

DOI 10.14258/izvasu(2014)1.1-03

Вопрос влияния структурного состояния поликристаллических металлов и сплавов на их термомеханические свойства является чрезвычайно важным в применении к задаче создания новых нанокристаллических высокотвердых материалов и определения их упругих модулей, предела текучести и ударной адиабаты. Для широкого класса материалов их предел текучести обратно пропорционален квадратному корню из размера зерна. Это соотношение, известное как закон Холла-Петча, экспериментально подтверждается, начиная с миллиметрового диапазона вплоть до субмикронных размеров зерна. Существенным вопросом в данном случае является, насколько глубоко в нанометровый диапазон продолжается эта зависимость. Существующие эксперименты [1, 2] показывают, что для самых малых размеров зерна порядка

In this paper, a method for molecular dynamics simulation of polycrystalline copper is proposed. Atoms of polycrystalline copper are placed in a simulation cell in accordance with the face-centered cubic lattice. Then the system is heated above its melting point under pressure equal to the atmospheric pressure. The melt obtained is cooled abruptly to the temperature range from 400K to 1200K under the atmospheric pressure. After that, the atomic system evolution at constant temperature leads to homogeneous nucleation of copper crystallites with the growth time of several tens of nanoseconds and results in polycrystalline sample formation. Based on the results of molecular dynamics study of uniaxial deformation, the yield stress increase with the grain size decrease from 14 nm to 6 nm in accordance with the Hall-Petch relation is shown. Further decrease of the grain size leads to the yield stress decrease due to the change of microscopic deformation mechanism. Young's modulus decrease is observed for polycrystalline copper with the grain size less than 10 nm.

Key words: molecular dynamics, polycrystal, uniaxial deformation.

десяти нанометров рост твердости останавливается и в некоторых случаях зависимость может даже смениться на обратную [3, 4]. Ряд публикаций [5, 6], посвященных моделированию механического поведения нанокристаллических металлов на атомном уровне, также подтверждает данную тенденцию. Привлечение к решению данной проблемы метода молекулярной динамики позволило выявить новый важный механизм деформации — зернограничное проскальзывание, который в нанокристаллических материалах успешно конкурирует с дислокационным механизмом и качественно меняет поведение, характерное для закона Холла-Петча. Несмотря на определенный прогресс в решении данной проблемы, остается целый ряд вопросов, которые требуют своего решения. Так, формирование начальной структуры

материала в [5, 6] выполняется методом многогранников Вороного, который является исключительно геометрическим и не принимает во внимание различие в энергетике возникающих в результате его применения границ зерен. Этот факт, в свою очередь, должен привести к чрезвычайно высокой доле высокоэнергетических границ зерен, что выглядит не совсем адекватным, если принять во внимание существующую тенденцию разнообразных равновесных систем в природе организовываться в соответствии с распределением Больцмана. Кроме того, данный метод формирования начальной структуры поликристалла исключает наличие начальных дефектов внутри зерен.

Моделирование проводилось методом молекулярной динамики. Взаимодействие атомов меди рассчитывалось в рамках метода внедренного атома [7]. Расчет траекторий движения проводился с помощью параллельного молекулярно-динамического пакета LAMMPS [8]. Для формирования начальных данных атомы размещались в расчетной ячейке в соответствии с гранецентрированной кубической решеткой. Затем полученная система разогревалась выше точки плавления, поддерживая давление, равное атмосферному. Полученный расплав резко охлаждался при атмосферном давлении до температуры от 400 до 1200 К, после чего в процессе эволюции системы при постоянной температуре в ней происходит гомогенная нуклеация кристаллитов меди, которые растут в течение нескольких десятков наносекунд, формируя поликристалл. Затем для остановки роста зерен система охлаждалась до комнатной температуры 300 К. Различные режимы нуклеации и роста зерен приводят к формированию поликристаллического состояния с различной величиной среднего размера зерна. Для вычисления среднего размера зерна в системе применялась следующая процедура. Вводилось понятие кластера — множества всех связанных атомов с гранецентрированной кубической (ГЦК) и гексагональной плотноупакованной (ГПУ) локальной координацией. Понятие двух связанных атомов вводилось как условие того, что расстояние между ними в заданный момент времени меньше определенного, вычисляемого как первый минимум в парной функции радиального распределения. В результате выявления всех, определенных таким образом, кластеров было рассчитано среднее количество атомов $\bar{N}_{\text{кл}}$, им принадлежащих. Далее вычислялся средний диаметр ГЦК кластеров d по формуле:

$$d = \left(\frac{3\bar{N}_{\text{кл}}}{2\pi} \right)^{1/3} a, \quad (1)$$

где a — параметр кристаллической решетки. В выражении (1) использовано предположение о сферической форме кластеров, что в общем случае верно только с некоторой точностью.

Моделирование изотермического одноосного растяжения и сжатия композиции проводилось путем периодического масштабирования размера расчетной ячейки в заданном направлении с релаксацией системы в промежутках между масштабированием. При этом в данном направлении к системе прикладывались периодические граничные условия. Скорость деформации расчетной ячейки равнялась в данном случае 10^8 с^{-1} , что соответствовало относительной скорости границ расчетной ячейки около 2 м/с, что существенно меньше скорости звука в меди и в связи с этим соответствовало квазистатической деформации. Для моделирования процесса изотермической одноосной деформации поликристаллической меди формировалась расчетная ячейка размером примерно $18 \times 18 \times 18$ нм, содержащая 0.5 миллионов атомов. В случае самого большого размера зерна размер ячейки удваивался в каждом из трех направлений. Расчет одноосного растяжения полученных конфигураций атомов с различным размером зерна проводился при постоянной температуре, равной 300 К, и постоянном напряжении в поперечном направлении, близком к нулю. Вдоль всех трех координатных осей прикладывались периодические граничные условия. В постановке задачи с постоянной величиной поперечных напряжений наклон кривой на упругом участке нагружения (рис. 1) соответствует модулю Юнга среды. Первый максимум на кривой, за которым следует некоторый спад напряжения, интерпретировался как предел текучести.

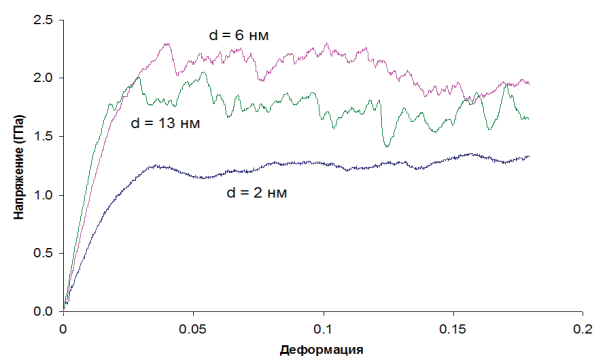


Рис. 1. Зависимость напряжения от степени деформации при одноосном изотермическом растяжении поликристаллов с размером зерна 2, 6 и 13 нм

Из рисунка 1 можно заметить, что зависимость кривой нагружения от размера зерна весьма существенная. Для самых малых величин размера зерна модуль Юнга почти в два раза меньше, затем он растет и выходит на насыщение около 110 ГПа. Аналогичное поведение наблюдалось ранее в расчетах молекулярной динамики [5, с. 1357]. Что касается предела текучести, то зависимость его от размера зерна также очень близка к наблюдаемой в [5, 6]. Рост предела те-

кучести с уменьшением размера зерна, характерный для соотношения Холла-Петча, достигает максимума около 8 нм и затем проявляется обратный эффект — уменьшение предела текучести (рис. 2). Данное качественное изменение механических свойств вызвано сменой механизма деформации [5]. С уменьшением зерна все большую роль играет зернограничное проскальзывание — скольжение зерен как целого относительно друг друга, по сравнению с традиционным дислокационным механизмом деформации.

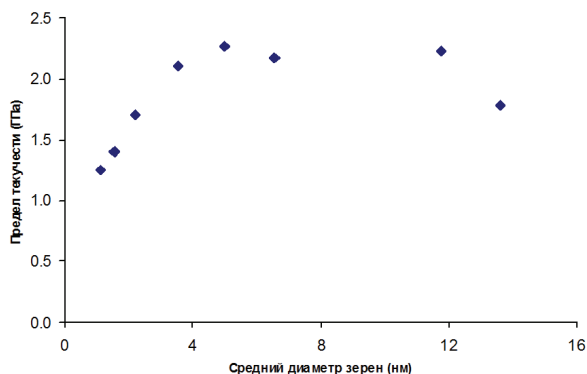


Рис. 2. Зависимость предела текучести от среднего размера зерна поликристаллической меди

Расчет одноосного изотермического сжатия нанокристаллической меди приводит к очень близким результатам для модуля Юнга и предела текучести. Общим выводом по данному разделу может служить то, что предложенная методика формирования начальных данных путем охлаждения из расплава позволяет получить атомные конфигурации поликристаллов меди с различным средним размером зерна, механические свойства которых как качественно, так и количественно хорошо совпадают с результатами [5, 6], полученными для монодисперсных поликристаллов, моделируемых методом многогранников Вороного.

Таким образом, в работе предложен подход, позволяющий моделировать образование поликристаллических материалов путем охлаждения из расплава. С помощью данного подхода получены атомные конфигурации меди, соответствующие поликристаллам со средним размером зерна от 2 до 16 нм. Выполнено молекулярно-динамическое исследование изотермического одноосного растяжения и сжатия полученных поликристаллов. Показано убывание модуля Юнга и предела текучести с уменьшением среднего диаметра зерна в нанокристаллической меди при $d < 10$ нм.

Библиографический список

1. Sanders P.G., Eastman J.A., Weertman J.R. Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium // *Acta Mater.* — 1997. — V. 45.
2. Schuh C.A., Nieh T.G., Iwasaki H. The effect of solid solution W additions on the mechanical properties of nanocrystalline Ni // *Acta Mater.* — 2003. — V. 51.
3. Chokshi A.H., Rosen A., Karch J., Gleiter H. On the validity of the hall-petch relationship in nanocrystalline materials // *Scr. Metall.* — 1989. — V. 23.
4. Conrad H., Narayan J. Mechanism for grain size softening in nanocrystalline Zn // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — V. 81.
5. Schiøtz J., Jacobsen K. W. A Maximum in the Strength of Nanocrystalline Copper // *Science.* — 2003. — V. 301.
6. Куксин А. Ю., Стегайлов В. В., Янилкин А. В. Атомистическое моделирование пластичности и разрушения нанокристаллической меди при высокоскоростном растяжении // *Физика твердого тела.* — 2008. — Т. 50, № 11.
7. Mishin Y. et al. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // *Phys. Rev. B.* — 2001. — V. 63.
8. Plimpton S. J. Fast Parallel Algorithms for Short-range Molecular Dynamics // *J. Comp. Phys.* — 1995. — V. 117.