

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ

УДК 539.3:669.01:681.142.33

Компьютерный эксперимент по деформации нанокристаллов системы хром–ниобий. Сообщение 2. Механические свойства

А. П. Шпак^а, В. В. Огородников^б, К. В. Малишевский^б, Ю. А. Куницкий^в

^а Институт металлофизики им. В. Г. Курдюмова НАН Украины, Киев, Украина

^б Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины, Киев, Украина

^в Технический центр НАН Украины, Киев, Украина

В парнопотенциальном приближении проведено молекулярно-динамическое моделирование процесса растяжения нанокристаллов хрома, ниобия и бикристаллов Cr–Nb. Получены и проанализированы зависимости потенциальной энергии, числа парных взаимодействий, работы деформации, напряжения, поперечного сужения и коэффициента Пуассона от деформации при разных ориентациях нанокристаллов относительно усилия растяжения. Рассчитаны характеристики упругости, текучести и прочности нанокристаллов.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, молекулярная динамика, межатомный потенциал, нанокристалл, хром, ниобий, бикристалл, растяжение, удлинение, напряжение, деформация, коэффициент Пуассона, упругость, текучесть, прочность.

В сообщении 1 [1] по результатам молекулярно-динамического моделирования процесса растяжения нанокристаллов хрома, ниобия и бикристаллов Cr–Nb детально исследованы механизмы атомно-структурных перестроек в нанокристаллах системы Cr–Nb, что позволило лучше изучить внутренние процессы, протекающие в микрослоистых композитах при глубоких степенях деформации. Там же приведены сведения об использованных потенциалах и методике молекулярно-динамических расчетов. В настоящей работе по данным тех же модельных экспериментов построены зависимости потенциальной энергии E , числа парных взаимодействий N , работы деформации A , напряжения σ , коэффициентов Пуассона ν и поперечного сужения S/S_0 от величины деформации ε при разных ориентациях нанокристаллов относительно растягивающего усилия \bar{P} . Рассчитаны характеристики упругости, текучести и прочности исследованных нанокристаллов. Опробование межатомных потенциалов и методики получения результатов проведено ранее [2–5]. Исследованию механических характеристик других материалов, моделируемых методами молекулярной динамики, посвящены работы [6–9].

Моделируемые образцы представляли собой цилиндры (с точностью до кристаллографической огранки) длиной 4–5 нм и поперечником 2–2,5 нм в зависимости от варианта застройки нанокристалла и сорта атомов. Кристаллит содержал 1168–1387 атомов. Удельная площадь внешней поверхности кристаллитов примерно одинакова (2,38–2,39 нм⁻¹). Удельная поверхностная энергия для хрома равна примерно 3,90, для ниобия – 6,34 Дж/м².

Хром. На рис. 1,а представлено изменение потенциальной энергии бикристалла E как суммарной энергии всех парных взаимодействий в расчете на один атом в процессе растяжения ($E = \frac{1}{2N_a} \sum_i \sum_{j \neq i} U_{ij}$, где N_a –

общее число атомов в кристалле; U_{ij} – энергия одного взаимодействия). На первой стадии деформации (до 11, 12 и 18% для трех ориентаций соответственно) наблюдается увеличение потенциальной энергии с нарастающей скоростью. На изменение энергии влияют два противоположных процесса: релаксационные смещения поверхностных атомов из-за нескомпенсированности связей, понижающие E , и увеличение расстояния между атомами в объеме образца, повышающее E . В результате вначале энергия почти не изменяется, а затем растет приблизительно по линейному закону.

Первая стадия завершается достижением пикового значения энергии $E_{\text{упр}}$, особенно высокого для растяжения вдоль направления $\langle 111 \rangle$ – застройка $(111) \perp \vec{P}$. Такое повышение энергии обусловлено увеличением межатомных расстояний в направлении растяжения, т.е. упругой деформацией. В отличие от массивных кристаллов, в нанокристаллах участок упругой деформации значительно больше, причем существует явная связь $\varepsilon_{\text{упр}}$ с направлением растяжения. При растяжении вдоль направлений $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ между атомами действуют в основном нормальные напряжения (потенциал работает на разрыв), при $\langle 111 \rangle$ – касательные (потенциал работает на сдвиг). Кроме того, плоскости (111) не могут переориентироваться, поскольку это требует больших энергетических затрат. Поэтому в последнем варианте $\varepsilon_{\text{упр}}$ и $E_{\text{упр}}$ максимальны.

Вторая стадия деформации начинается с пика энергии E (рис. 1,а), при которой кристалл теряет устойчивость и выбирает путь для сброса накопленной энергии за счет атомных перестроек. После резкого сброса энергия вновь увеличивается: весьма значительно для растяжения вдоль направления $\langle 100 \rangle$, умеренно – для $\langle 110 \rangle$ и очень слабо – для $\langle 111 \rangle$. Случай с растяжением вдоль направления $\langle 111 \rangle$ (застройка $(111) \perp \vec{P}$) характерен для хрупкого разрушения кристалла, при котором атомные перестройки минимальны, а зона разрушения очень локализована. При деформации примерно 19% этот кристалл фактически уже разрушен, хотя слабая связь между осколками, как следует из структурных наблюдений [1], поддерживается еще довольно долго (до 49%). При растяжении вдоль направления $\langle 110 \rangle$ и особенно $\langle 100 \rangle$ кристалл благодаря атомным перестройкам оказался способным выдерживать увеличивающиеся нагрузки.

Третья стадия деформации начинается с момента, когда определилось место разрушения в виде зародышевой трещины, и продолжается до полного разрушения, т.е. разрыва всех межатомных связей в разрушенном

сечении [1]. Для этой стадии характерно незначительное изменение потенциальной энергии, поскольку ослабленное сечение почти не сопротивляется деформации. При растяжении вдоль направления $\langle 100 \rangle$ это очень ограниченный участок кривой (57...58%). В варианте направления $\langle 110 \rangle$ зародышевая трещина оформилась уже к деформации 19% [1], и третья стадия растянулась на интервал 19...60%, в котором потенциальная энергия умеренно повышается, что обусловлено особенностями роста данной трещины.

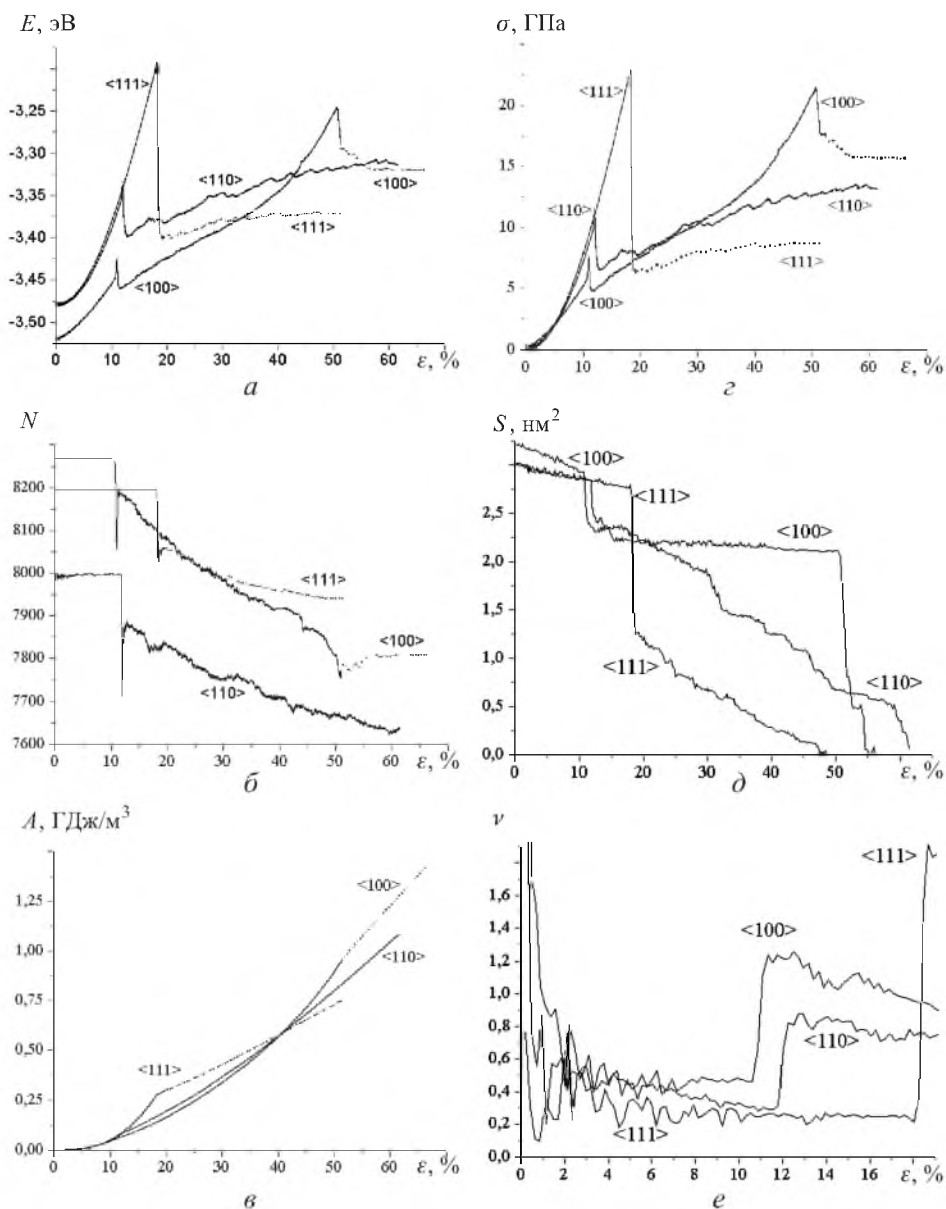


Рис. 1. Зависимости значений потенциальной энергии всего кристалла (а), числа межатомных взаимодействий (б), работы деформации (в), напряжения (г), площади сечения (д) и коэффициента поперечного сужения (е) от величины деформации нанокристалла хрома вдоль направлений $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$.

Анализ структурных изображений показал, что возникшая трещина кристаллографически хорошо оформлена и ее продвижение связано с перестройкой возникших межзеренных границ, требующей больших энергетических затрат [1]. В противоположность этому трещина в случае направления $\langle 111 \rangle$ развивается хрупко, почти без затрат дополнительной энергии. Процесс разрушения затягивается (18,4...49%) только из-за постоянной скорости растяжения. Если бы растяжение осуществлялось с постоянной скоростью нагружения, как при натуральных испытаниях на прочность, то разрушение произошло бы гораздо быстрее.

Рис. 1,б иллюстрирует изменение числа межатомных взаимодействий N в кристаллах в процессе их растяжения. Из-за кристаллографических особенностей застройки начальное число атомов в кристаллах и соответственно число взаимодействий N разные.

На первой стадии деформации число взаимодействий N не изменяется, что соответствует области упругой деформации. Первое скачкообразное уменьшение N совпадает с пиком потенциальной энергии и объясняется выходом атомов второй координационной сферы из зоны действия парного потенциала. Происходящая в это время перестройка структуры приводит к почти мгновенному, но лишь частичному восстановлению числа взаимодействий. Для застройки $(111) \perp \bar{P}$ характерно очень слабое восстановление числа N в начале второй стадии и его малое изменение в дальнейшем, что еще раз подтверждает хрупкий характер разрушения этого кристалла [1]. Отметим, что перед окончательным разрушением кристалла и даже после него число взаимодействий может незначительно увеличиться в связи с протеканием релаксационных процессов локальной подстройки атомной структуры.

На рис. 1,в представлено изменение работы деформации A по мере растяжения образца. Работа деформации определялась как $A = \frac{N_a \Delta L}{V_0 L_0} \sum \Delta E_m$,

где $\Delta L = \text{const}$ – удлинение образца на одной итерации; m – индекс суммирования по числу итераций. Интегральная зависимость имеет сглаженный характер, ее изменение показало, что основная часть работы расходуется на осуществление атомно-структурных перестроек. Для направления $\langle 100 \rangle$ полная работа – наибольшая, для направления $\langle 111 \rangle$ – наименьшая.

На рис. 1,г показана зависимость $\sigma(\varepsilon) = \Delta E(\varepsilon) N_a K / V_0$, где $\Delta E = E - E_{\min}$; E_{\min} – минимальная энергия, достигаемая после начальной релаксации; V_0 – объем образца; $K = (L_0 + R_0) / R_0$ – коэффициент, учитывающий отношение площади поверхности цилиндра к площади приложения нагрузки; L_0 и R_0 – исходные длина и радиус цилиндра. Короткий начальный период уменьшения σ обусловлен релаксационными смещениями атомов на поверхности. Наиболее интенсивно этот процесс происходит при ориентации $(111) \perp \bar{P}$, поскольку внешняя поверхность в таком случае оказывается самой неравновесной. Соответственно самая равновесная поверхность имеет место при застройке $(100) \perp \bar{P}$. В общих чертах изменение σ аналогично изменению E . На участке деформации 20...30% величина σ одинакова для направлений $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$, для направления $\langle 100 \rangle$ кристалл, претерпев-

ший перестройку по всей длине [1], проявляет более высокую устойчивость, и только пиковое увеличение напряжения σ приводит к его разрушению. Наименьшее сопротивление разрушению на участке деформации $\varepsilon > 20\%$ оказывает структура $(111)\perp\bar{P}$.

В табл. 1 приведены упругие и прочностные характеристики модельных нанокристаллов хрома по данным компьютерных исследований.

Т а б л и ц а 1

Упругие и прочностные характеристики модельных нанокристаллов хрома

| Направление растяжения | ε_y , % | Y , ГПа | σ_T , ГПа | ε_B , % | A_B , ГДж/м ³ | σ_B , ГПа |
|------------------------|---------------------|-----------|------------------|---------------------|----------------------------|------------------|
| <100> | 11 | 73 (328) | 6,1 | 51 | 0,92 | 21,4 |
| <110> | 12 | 125 (266) | 9,9 | 59 | 1,03 | 13,5 |
| <111> | 18 | 175 (250) | [22,9] | 18 | 0,27 | 22,9 |

Примечание. Здесь и в табл. 2, 3: ε_y , ε_B – упругая и полная деформация; Y – модуль Юнга; σ_T , σ_B – пределы текучести и прочности материала; A_B – полная работа деформации; значения в круглых скобках – экспериментальные данные.

Отметим, что результаты компьютерных испытаний на разрыв нанокристаллических образцов при постоянной скорости растяжения могут несколько отличаться от результатов натуральных испытаний массивных образцов при постоянной скорости нагружения. Поскольку начальная стадия растяжения в данных исследованиях включает этап атомной подстройки структуры и соответствующей релаксации напряжений, участок упругой деформации сдвинут в сторону более высоких значений. Выход на прямолинейную зависимость проходит постепенно. Поэтому приведенные в табл. 1 значения $Y_{\langle hkl \rangle}$ существенно ниже экспериментальных данных для монокристаллов. Кроме того, играет роль высокая удельная поверхность нанокристаллов. Модуль Юнга массивных образцов хрома составляет 280 ГПа [10].

У массивного хрома текучесть отсутствует [10]. В виде нанобразца хром проявляет значительную текучесть в направлении <100>, связанную с переориентацией плоскостей и перемещением границ [1]. При этом предел текучести σ_T у нанобразца хрома оказался намного выше, чем у других массивных ОЦК-металлов, обладающих пластичностью; например, в 20 раз выше, чем у массивного ниобия [11]. Еще более высокое значение σ_T отмечается у образца, подвергнутого растяжению вдоль направления <110>. Такие высокие значения σ_T естественны для бездислокационных образцов. Приведенное в табл. 1 в квадратных скобках значение σ_T для направления <111> не является пределом текучести, а обозначает лишь высоту барьера Пайерлса–Набарро перед возникновением разрушающей трещины и совпадает с пределами упругости σ_y и прочности σ_B . Предел прочности массивных поликристаллических образцов хрома составляет 0,084 ГПа [11], что на два-три порядка ниже, чем прочность исследованных нанобразцов (табл. 1), которая, как и следовало ожидать, соответствует прочности нитевидных кристаллов-усов [11].

Для построения зависимости значений площадей наименьших сечений кристаллита S от величины деформации ε (рис. 1,д) была решена задача триангуляции для описывающего многоугольника, площадь которого принималась за истинное значение. Кристаллит сканировался по всей длине для каждой выбранной координаты, вблизи которой выделялся атомарный слой толщиной 0,5 нм (по 0,25 нм слева и справа). При этом полагали, что все атомы, попавшие в слой, находятся в одной плоскости.

Для всех направлений в области упругой деформации прослеживается ожидаемое равномерное сужение и практически линейная зависимость $S(\varepsilon)$: для $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ до 12% деформации, для $\langle 111 \rangle$ до 18%. Далее идет резкий спад, особенно в случае кристаллитов, подвергнутых растяжению вдоль направления $\langle 111 \rangle$: от 2,75 до 1,25 нм² на отрезке 18...18,4%, что совпадает по времени с резким уменьшением числа межатомных взаимодействий N (рис. 1,б). В дальнейшем (до 52% деформации) сечение кристаллита, деформируемого вдоль направления $\langle 100 \rangle$, почти не изменяется. Затем, когда исчерпываются возможности стабилизирующих структурных перестроек, кристаллит катастрофически разрушается. Не столь устойчивыми на отрезке 15...50% деформации оказываются сечения нанокристаллов, растягиваемых в направлениях $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$.

Зависимости изменения площадей можно использовать для оценки коэффициента поперечного сужения. Если описывающий многоугольник принять равновеликим описанной окружности, то можно оценить диаметр поперечника, а следовательно, и коэффициент Пуассона:

$$\nu = \frac{\Delta D}{\varepsilon} = \frac{1 - D/D_0}{\varepsilon} = \frac{1 - \sqrt{S/S_0}}{\varepsilon},$$

где D – диаметр; S – площадь сечения.

После стабилизационного периода (0...2%) для направления $\langle 111 \rangle$ значения коэффициента ν (рис. 1,е) осциллируют вблизи 0,3, и до предела упругости (18%) характер их поведения сохраняется. В области разрушения ($> 18\%$) значения ν резко увеличиваются (до 1,9). Такие же скачки наблюдаются и на кривых для других направлений растяжения, но они значительно ниже (0,9 для $\langle 110 \rangle$ и 1,3 для $\langle 100 \rangle$). Эти характеристики выходят за область упругой деформации и не имеют прямого физического смысла, однако они полезны при оценке дальнейшего процесса разрушения моделируемых нанокристаллов. Для направления $\langle 100 \rangle$ значения ν в упругой области изменяются вблизи 0,5. Поведение коэффициента ν для направления $\langle 110 \rangle$, где средние значения в интервале 4...12% относительной деформации монотонно убывают от 0,5 до 0,3, – нестабильное.

Ниобий. На рис. 2,а показана зависимость средней потенциальной энергии E атома в кристалле ниобия от удлинения ε при разных начальных ориентациях: $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Характер кривых аналогичен таковому для нанокристаллов хрома (рис. 1,а), за исключением лишь более высоких значений потенциальной энергии для ниобия и некоторых несущественных отличий. Таким образом, характер зависимостей $E(\varepsilon)$ для ниобия и хрома подобен, что связано с близостью их электронного и структурного строе-

ния. Подобными оказались и атомно-структурные перестройки, происходящие под действием механических напряжений. Можно отметить лишь небольшое отличие в относительном положении кривых для направлений $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ при деформациях 12...50%. Дополнительный пик на кривой для направления $\langle 100 \rangle$ в кристаллах ниобия при деформации 56% говорит о некотором упрочнении его перед разрушением за счет атомной перестройки.

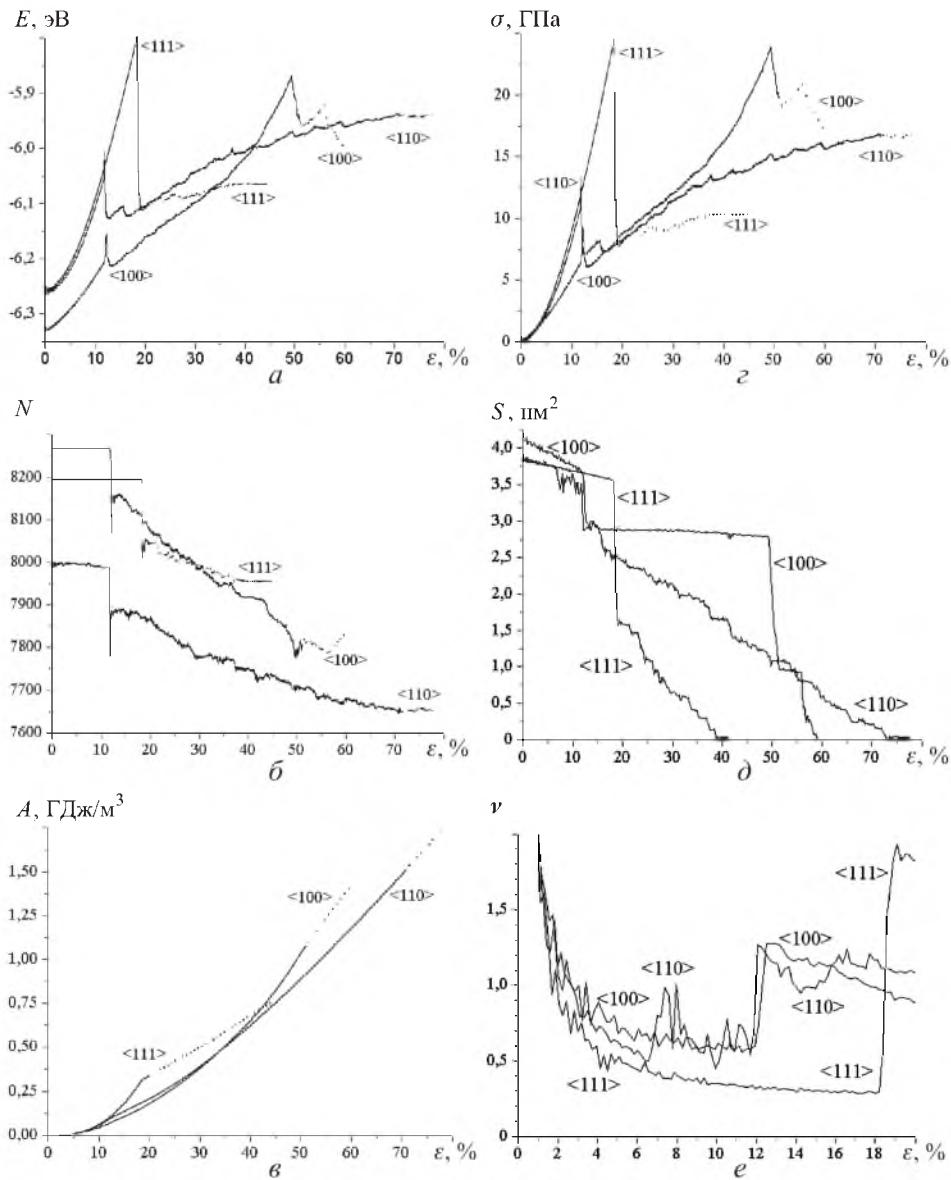


Рис. 2. Зависимости значений потенциальной энергии всего кристалла (а), числа взаимодействий (б), работы деформации (в), напряжения (г), площади сечения (д) и коэффициента поперечного сужения (е) от величины деформации нанокристалла ниобия вдоль направлений $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$.

Число межатомных взаимодействий N (рис. 2, б) в кристаллах ниобия изменяется аналогично хрому, что соответствует схожести потенциалов и

физической природе этих элементов. Наибольшее число связей в процессе разрушения теряет кристалл с застройкой $(100)\perp\bar{P}$ – 420, затем с застройкой $(110)\perp\bar{P}$ – 340, и наконец, с $(111)\perp\bar{P}$ – 300. Последний теряет меньше связей, так как распадается на более совершенные куски.

Характер поведения работы деформации A кристаллов ниобия (рис. 2,в) и хрома аналогичен. Однако уровень энергетических затрат на деформацию ниобия выше в связи с более высокой энергетикой его межатомных взаимодействий.

На рис. 2,г представлена зависимость $\sigma(\varepsilon)$ для ниобия. Можно было бы ожидать, что по этой чисто механической характеристике ниобий и хром будут существенно отличаться друг от друга, поскольку в макросостоянии ниобий пластичен, а хром отличается высокой склонностью к охрупчиванию. Однако указанные зависимости в обоих случаях очень подобны и отражают ход энергетической зависимости $E(\varepsilon)$. Это означает, что хрупкость хрома обусловлена не особенностями межатомных взаимодействий, а другими факторами.

Согласно хорошо известной гипотезе хром обладает повышенной хрупкостью из-за влияния примесей внедрения, растворимость которых в хrome гораздо ниже, чем в ниобии. Результаты настоящего компьютерного эксперимента согласуются с этой электронно-химической трактовкой. Известно немало подтверждений, что даже такие очень хрупкие материалы, как сверхтвердые соединения [12] и ковалентные кристаллы, в микро- и наномасштабах в отсутствие примесей ведут себя весьма пластично, а при определенных условиях и сверхпластично [13]. Макроскопическая хрупкость может быть обусловлена влиянием примесей, дефектов кристаллической структуры или отсутствием плоскостей легкого скольжения.

Как и в случае хрома, короткий начальный период уменьшения напряжения σ обусловлен релаксационными смещениями атомов на поверхности. Как показал анализ первичных цифровых результатов, наиболее интенсивно этот процесс происходит в случае застройки $(111)\perp\bar{P}$, поскольку внешняя поверхность при такой застройке оказывается самой неравновесной. Согласно данным этого же анализа, самая равновесная поверхность реализуется при застройке $(100)\perp\bar{P}$.

Дальнейшее изменение напряжения σ до достижения им пикового значения аналогично изменению E , после пика и резкого спада σ в отличие от E уменьшается. Для направления $\langle 111 \rangle$ пиковое напряжение σ достигает 24,6 ГПа, для $\langle 110 \rangle$ – 11,0 ГПа и для $\langle 100 \rangle$ – 6,4 ГПа. Для $\langle 111 \rangle$ на участке деформации от 20% и выше напряжение σ – минимальное, для $\langle 100 \rangle$ – максимальное и для $\langle 110 \rangle$ получены средние значения σ .

В табл. 2 приведены упругие и прочностные характеристики нанокристаллов ниобия по данным компьютерных исследований. Вычисленные модули Юнга $Y_{\langle hkl \rangle}$ для ниобия близки к таковым для хрома. Значения $Y_{\langle hkl \rangle}$ для монокристаллов ниобия (в круглых скобках) значительно отличаются как от аналогичных данных для хрома, так и между собой. Причины таких аномалий пока не ясны. В случае поликристаллических образцов ниобия модуль Юнга составляет 106...157 ГПа [11]. Для нанокристаллов зна-

чения Y , найденные по углу наклона прямолинейных участков на рис. 2,з, охватывают более широкий интервал, а именно: 66...179 ГПа (табл. 2).

У массивного ниобия предел текучести составляет 0,27 ГПа [10]. Нанообразец ниобия проявляет значительную текучесть в направлении $\langle 100 \rangle$, связанную с переориентацией плоскостей, двойникованием, фрагментацией и перемещением границ. При этом его предел текучести оказался в 24 раза выше, чем массивного ниобия. Еще более высокое значение σ_T имеет образец, подвергнутый растяжению вдоль направления $\langle 110 \rangle$ (табл. 2). Отметим, что, как и для хрома, такие высокие значения σ_T естественны для бездислокационных образцов. Значение $\sigma_T = 24,6$ ГПа для $\langle 111 \rangle$ является, как и в случае хрома, пределом упругости σ_Y и пределом прочности σ_B .

Т а б л и ц а 2

Упругие и прочностные характеристики модельных нанокристаллов ниобия

| Направление растяжения | ε_Y , % | Y , ГПа | σ_T , ГПа | ε_B , % | A_B , ГДж/м ³ | σ_B , ГПа |
|------------------------|---------------------|------------|------------------|---------------------|----------------------------|------------------|
| $\langle 100 \rangle$ | 12 | 66 (151,5) | 6,4 | 49 | 1,01 | 23,9 |
| $\langle 110 \rangle$ | 12 | 133 (92,2) | 11,0 | 71 | 1,50 | 16,9 |
| $\langle 111 \rangle$ | 18 | 179 (81,6) | [24,6] | 18 | 0,31 | 24,6 |

Предел прочности массивных поликристаллических образцов ниобия составляет 0,35 ГПа [11], что в 70 раз ниже прочности исследованных нанообразцов (табл. 2), которая соответствует прочности бездислокационных нитевидных кристаллов-усов [11]. Относительное удлинение ε_B для массивного ниобия достигает 50%, что совпадает с удлинением модельных нанокристаллов, растянутых по направлению (100). Для направлений (110) и (111) ε_B составляет 71 и 18% соответственно. Можно ожидать, что в нанокристаллических образцах и в слоистых композитах неблагоприятно ориентированные к нагрузке плоскости $\langle 111 \rangle$ получают возможность переориентироваться в плоскости $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$, обеспечивая повышение пластичности при высоких значениях прочности.

Результаты расчетов поперечного сечения S нанокристалла ниобия при растяжении с учетом смещения минимального сечения вдоль продольной оси представлены на рис. 2,д. Для направлений $\langle 100 \rangle$ (до 12% деформации) и $\langle 111 \rangle$ (до 18%) в области упругой деформации прослеживается равномерное сужение. При растяжении вдоль направления $\langle 110 \rangle$ участок до 12% не столь монотонный, что обусловлено фрагментацией кристалла [1]. Далее на кривых для кристаллов с деформацией 10...12% вдоль направлений $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ наблюдается резкий спад S . Для кристаллов, подвергнутых растяжению в направлении $\langle 111 \rangle$, на участке деформации 18...18,7% спад S более резкий (от 3,7 до 1,7 нм²). В случае направлений $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ происходит почти равномерное утончение до полного разрушения (до 73 и 40% соответственно). Иначе ведут себя кристаллы с начальной застройкой (100): их сечение выходит на горизонтальный участок кривой при деформации 12...49%, что связано со структурной перестройкой (100) \rightarrow (110), при

которой площадь сечения остается постоянной. После этого, как и в случае $\langle 111 \rangle$, наступает хрупкое разрушение. В узком интервале деформаций 49...51% кристалл, растягиваемый вдоль (100), теряет практически 2 нм^2 в поперечнике и после кратковременной стабилизации (51...56%) разрушается (56...58%). По сравнению с хромом ниобий более устойчив в поперечном сечении при растяжении в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ и менее устойчив в направлении $\langle 111 \rangle$.

Коэффициент поперечного сужения ν для ниобия, рассчитанный по описанной выше методике и характеризующий область упругой деформации, представлен на рис. 2,е. Как и в случае хрома, расчет охватывает более широкую область, включающую начальный период поверхностной релаксации, упругую область и часть неупругой области (до 20%), что позволяет проследить изменение ν на граничных участках и четче выделить область упругой деформации. Последней должен соответствовать горизонтальный участок кривой ($\nu = \text{const}$).

Как видно, имеется постепенный переход от начального периода релаксации к упругой деформации. Для направлений $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ довольно хорошо просматривается участок, удовлетворяющий условию $\nu \approx \text{const}$ перед резким скачком, соответствующим лавинообразному разрыву связей и резкому уменьшению поперечного сечения. В случае $\langle 111 \rangle$ значение ν для интервала деформации 4...19% находится в пределах 0,5...0,3. Для $\langle 100 \rangle$ участок упругой деформации уже (6...12%) и $\nu = 0,7...0,6$. Направление $\langle 110 \rangle$ характеризуется нестабильностью значений ν : до деформации 6% $\nu \rightarrow 0,4$, затем резко возрастает до единицы, после чего сильно осциллируя, снижается до 0,6 при деформации 12%. Это подтверждает нестабильность данной застройки в области упругой деформации.

Хром–ниобий. На рис. 3,а представлено изменение потенциальной энергии бикристалла E . Аналогичные зависимости построены отдельно для зерен хрома (рис. 3,б) и зерна ниобия (рис. 3,в).

В начальной стадии растяжения (до 0,5%) имеется тенденция к небольшому уменьшению величины E бикристалла и отдельных кристаллитов независимо от ориентации (рис. 3,а–в). Это связано с релаксационными процессами, а именно: атомной подстройкой на боковой поверхности образца и межфазной границе. Отмечается также незначительное увеличение числа связей N (рис. 3,г) и существенное снятие напряжений (рис. 3,е). Работа деформации остается нулевой (рис. 3,д).

В интервале деформаций 0,5...8% происходит резкое повышение энергии E и напряжения σ , обусловленное увеличением межатомных расстояний и атомными смещениями вследствие структурных перестроек (это подтверждает рост числа связей N на предыдущем этапе). В случае направления $\langle 100 \rangle$ вклад в изменение E вносит также разрыв некоторой доли межатомных связей, тогда как в случае $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ число связей почти не меняется (рис. 3,г). Начинается постепенное увеличение работы деформации (рис. 3,д).

Для бикристалла с направлением растяжения $\langle 100 \rangle$ этот процесс заканчивается выходом энергии E на горизонтальный участок кривой при дефор-

мации 8...9% (рис. 3,а), для бикристалла и отдельных зерен с направлениями $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ E выходит на острый пик (рис. 3,б,в). При этом имеет место интенсивный разрыв связей, который в случае $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ носит лавинообразный характер (рис. 3,з). В свою очередь, разрыв связей способствует быстрому освобождению упругой энергии и возникновению новых связей за счет атомных подстроек в других местах, что приводит к частичному восстановлению значений N , E и σ (деформация 9...10%). Особенности изменения указанных параметров в случае $\langle 100 \rangle$ связаны с началом существенной атомно-структурной перестройки $(100)\perp\vec{P} \rightarrow (110)\perp\vec{P}$ [1].

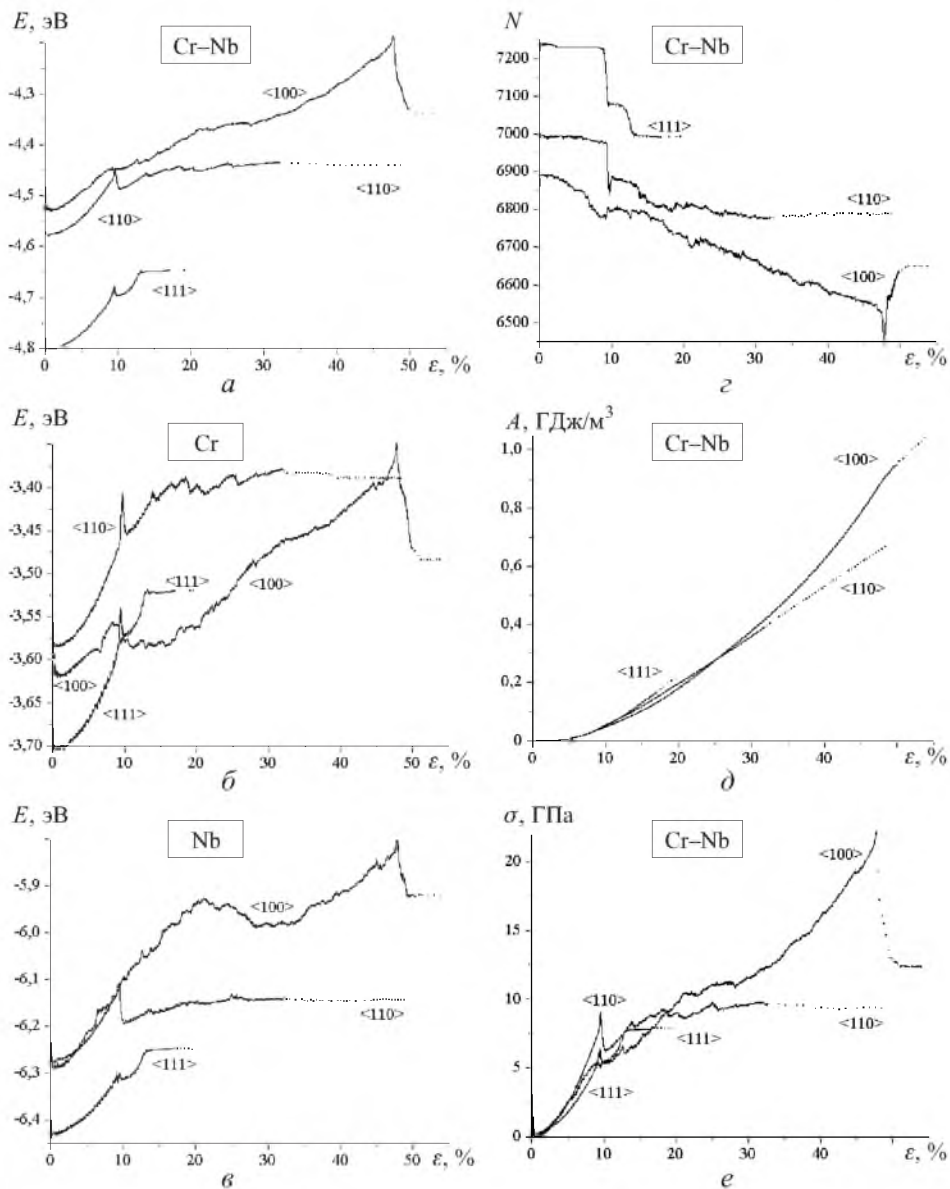


Рис. 3. Зависимости потенциальной энергии E всего кристалла (а), зерен хрома (б) и ниобия (в), а также числа взаимодействий N (г), работы деформации A (д) и напряжения σ (е) от величины деформации ϵ бикристалла Cr-Nb вдоль направлений $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$.

Дальнейшее растяжение бикристалла вдоль направления $\langle 100 \rangle$ ($> 10\%$) сопровождается длительным и значительным изменением E до деформации разрушения 48% (рис. 3,а), причем в зерне ниобия наблюдается спад E на участке 21...36% (рис. 3,в). Заметим, что именно в этот период происходит эстафетная передача деформации от зерна ниобия к зерну хрома, приводящая к релаксации напряжений и уменьшению энергии в зерне ниобия (рис. 3,в) а также противоположным изменениям в зерне хрома (рис. 3,б). Число взаимодействий в бикристалле непрерывно уменьшается (рис. 3,е), а работа деформации стремительно растет (рис. 3,д). На конечной стадии деформации (45...48%) возникает новый пик энергии и напряжения с одновременным лавинообразным уменьшением числа связей. После разрушения происходит интенсивный процесс атомно-структурной релаксации в образовавшихся осколках с возникновением новых связей и снятием напряжений, который заканчивается по достижении 50% растяжения.

Деформация выше 10% для направления $\langle 110 \rangle$ характеризуется постепенным увеличением параметров E , A и σ при одновременном уменьшении N до момента разрушения (34,5%), после чего имеет место слабая тенденция к понижению E , связанная с релаксацией напряжений в осколках хрома, которые претерпели наибольшие структурные изменения. Уменьшается также угол наклона зависимости $A(\varepsilon)$.

В случае $\langle 111 \rangle$ рост энергии E заканчивается при 13,5%, т.е. в момент нового лавинообразного разрыва связей и возникновения магистральной трещины, приводящей к быстрому чисто хрупкому разрушению (14,5%). Далее энергия осколков не изменяется, так как они уже имеют правильное кристаллографическое строение.

В табл. 3 приведены упругие и прочностные характеристики модельных бикристаллов Cr–Nb по данным компьютерных исследований.

Т а б л и ц а 3

Упругие и прочностные характеристики модельных бикристаллов Cr–Nb

| Направление растяжения | ε_y , % | Y , ГПа | σ_T , ГПа | ε_B , % | A_B , ГДж/м ³ | σ_B , ГПа |
|------------------------|---------------------|-----------|------------------|---------------------|----------------------------|------------------|
| $\langle 100 \rangle$ | 8,4 | 78 | 5,2 | 48 | 0,95 | 22,2 |
| $\langle 110 \rangle$ | 9,5 | 123 | 9,0 | 32 | 0,39 | 9,6 |
| $\langle 111 \rangle$ | 9,6 | 83 | [5,7] | 17 | 0,17 | 7,9 |

Предел упругой деформации ε_y бикристаллов по сравнению с модельными монокристаллами Cr и Nb немного понизился в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$, в направлении $\langle 111 \rangle$ он упал более чем в два раза. Аналогичное снижение отмечено также для модуля Юнга Y в направлении $\langle 111 \rangle$. Приведенное в табл. 3 в квадратных скобках значение предела упругости $\sigma_y = 5,7$ ГПа для бикристалла ниже соответствующих данных для модельных монокристаллов в четыре раза (табл. 1, 2). Полное удлинение ε_B бикристаллов сильно изменилось только для направления $\langle 110 \rangle$, а именно: снизилось в два раза. Примерно также уменьшилась полная работа деформации A_B для направлений $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Предел прочности σ_B остался

на уровне монокристаллов только для направления $\langle 100 \rangle$, для других направлений он очень уменьшился, особенно для $\langle 111 \rangle$ (в три раза). Анализ этих данных свидетельствует о низкой прочности и пластичности межфазной границы Cr–Nb и большой вероятности транскристаллитного разрушения композитного материала, что отмечалось в [14].

Таким образом, полученные данные хорошо согласуются с существующими представлениями о возможных механизмах деформации металлов под нагрузкой и характере изменения механических свойств. Это представляет интерес для моделирования реального процесса в металлическом материале, так как парный потенциал является в некотором приближении решением квантово-механического уравнения для межатомных связей. Анализ показал, что парные потенциалы, вычисленные на основании экспериментально определенных свойств или полученные из специальных расчетов [15], достаточно адекватно описывают наиболее существенные энергетические и механические параметры межатомных взаимодействий в ОЦК-металлах. С другой стороны, получены четкие закономерности процессов деформирования и разрушения модельных материалов, позволяющие описать аналогичные процессы в нанокристаллах и разрабатываемых слоистых композитах системы Cr–Nb. Появляется возможность использования разработанной методики применительно к другим металлическим системам и последующего широкого варьирования материалов и условий деформации в зависимости от поставленных задач.

Резюме

У парнопотенційному наближенні проведено молекулярно-динамічне моделювання процесу розтягнення нанокристалів хрому, ніобію та бікристалів Cr–Nb. Отримано та проаналізовано залежності потенційної енергії, числа парних взаємодій, роботи деформації, напруження, поперечного звуження і коефіцієнта Пуассона від величини деформації при різних орієнтаціях нанокристалів відносно зусилля розтягнення. Обчислено характеристики пружності, текучості та міцності досліджених нанокристалів.

1. Шпак А. П., Огородников В. В., Малишевский К. В., Куницкий Ю. А. Компьютерный эксперимент по деформации нанокристаллов системы хром – ниобий. Сообщ. 1. Атомно-структурные перестройки // Пробл. прочности. – 2005. – № 1. – С. 5 – 23.
2. Огородников В. В., Малишевский К. В. Компьютерное моделирование процесса растяжения нанокристалла хрома: Тр. Ин-та пробл. материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины. Теория и моделирование электронного строения и свойств тугоплавких соединений, сплавов и металлов. – Киев, 1997. – С. 127 – 139.
3. Огородников В. В., Малишевский К. В. Молекулярно-динамическое моделирование растяжения бикристалла Cr–Nb: Тр. Ин-та пробл. материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины. Сер. 2. Моделирование в материаловедении. Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. – Киев, 2001. – Вып. 5. – С. 104 – 112.

4. Огородников В. В., Малишевский К. В. Компьютерное исследование атомного механизма деформации и разрушения бикристаллов хром-ниобий // Порошк. металлургия. – 2003. – № 1/2. – С. 82 – 91.
5. Огородников В. В., Малишевский К. В. Компьютерное исследование атомного механизма деформации и разрушения нанокристаллов ниобия: Тр. Ин-та пробл. материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины. Сер. Нанокристаллические материалы. – Киев, 2002. – С. 142 – 158.
6. Огородников В. В., Малишевский К. В. Молекулярно-динамическое моделирование растяжения нанокристалла NiAl // Металлофизика и новейшие технологии. – 2001. – **23**, № 8. – С. 1029 – 1039.
7. Latapie A. and Farkas D. Effect of grain size on the elastic properties of nanocrystalline α -iron // Scripta Mater. – 2003. – No. 48. – P. 611 – 615.
8. Farkas D., Van Swygenhoven H., and Derlet P. M. Intergranular fracture in nanocrystalline metals // Phys. Rev. – 2002. – **B66**.
9. Walsh P., Omeltchenko A., Kalia R. K., et al. Nanoindentation of silicon nitride: a multi-million atom molecular dynamics study // Appl. Phys. Lett. – 2003. – **22**. – P. 118 – 120.
10. Физика твердого тела. Энциклопедический словарь / Под ред. В. Г. Барьяхтара. – Киев: Наук. думка, 1998. – Том II. – 483 с.
11. Физика твердого тела. Энциклопедический словарь / Под ред. В. Г. Барьяхтара. – Киев: Наук. думка, 1996. – Том I. – 609 с.
12. Ковальченко М. С., Огородников В. В., Роговой Ю. И., Крайний А. Г. Радиационное повреждение тугоплавких соединений. – М.: Атомиздат, 1979. – 160 с.
13. Огородников В. В., Свердлик Н. Н. Экспериментальное исследование процесса уплотнения и гомогенизации дисперсных смесей псевдобинарной системы TiC–ZrC при спекании и горячем прессовании // Высоко-температурные карбиды. – Киев: Наук. думка, 1975. – С. 112 – 118.
14. Коломиец А. Т. О возможности создания вязких жаро-коррозионных материалов на основе ОЦК тугоплавких металлов // Электронная микроскопия и прочность материалов. – Киев: Ин-т пробл. материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины, 1997. – С. 77 – 85.
15. Ogorodnikov V., Maliszewski K., Lisenko A., and Bekenev V. Lattice energy, equation of state, and interatomic potential of Chromium // Phys. Streng. Plast. – 1996. – **16**. – P. 333 – 341.

Поступила 04. 12. 2003