

# НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ

УДК 539.3:669.01:681.142.33

## Компьютерный эксперимент по деформации нанокристаллов системы хром–ниобий. Сообщение 1. Атомно-структурные перестройки

А. П. Шпак<sup>а</sup>, В. В. Огородников<sup>б</sup>, К. В. Малишевский<sup>б</sup>, Ю. А. Куницкий<sup>в</sup>

<sup>а</sup> Институт металлофизики им. В. Г. Курдюмова НАН Украины, Киев, Украина

<sup>б</sup> Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины, Киев, Украина

<sup>в</sup> Технический центр НАН Украины, Киев, Украина

*В парнопотенциальном приближении проведено молекулярно-динамическое моделирование процесса растяжения нанокристаллов хрома, ниобия и бикристаллов хром–ниобий. Проиллюстрирован атомный механизм деформации и разрушения, который зависит от ориентации нанокристалла относительно действующего усилия  $\vec{P}$ . В случае стартовой ориентации  $(100)\perp\vec{P}$  действует механизм переориентации  $(100)\perp\vec{P} \rightarrow (110)\perp\vec{P}$ . В бикристалле сначала деформируется ниобий, а затем происходит эстафетная передача деформации от Nb к Cr. При стартовой конфигурации  $(110)\perp\vec{P}$  наблюдается фрагментация кристалла и зернограничные перестройки. В бикристалле кристаллит ниобия деформируется лишь в пределах упругой деформации; в то же время деформация со стороны хрома имеет хрупковязкий характер. При начальной конфигурации  $(111)\perp\vec{P}$  наблюдается механизм чисто хрупкого разрушения. Бикристалл разрушается во всех случаях по межфазной границе. Объяснены причины таких атомно-структурных преобразований.*

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, молекулярная динамика, межатомный потенциал, нанокристалл, хром, ниобий, бикристалл, растяжение, удлинение, деформация, механизм разрушения, структурные перестройки.

В последнее время появилось большое количество публикаций [1, 2], посвященных как фундаментальной науке о нанокластерах и наноструктурах, так и возможностям их применения в нанотехнологиях в связи с особыми магнитными, электрическими и механическими свойствами наноструктурных материалов. Процессы, протекающие на наноуровне, играют важную роль в формировании особых свойств микрокристаллических композиционных материалов, в частности микрослоистых композитов. Известна высокая жаропрочность микрослоистых хром-ниобиевых композитов [3]. Однако ряд проблем с их использованием обусловлен недостаточным знанием процессов, протекающих на наноуровне при интенсивных механических воздействиях.

Несмотря на резко возросшее количество работ по компьютерному моделированию молекулярной динамики в материалах, исследований, посвященных атомно-структурным перестройкам в нанобразцах при механическом деформировании, имеется сравнительно мало [4–6]. Неизученными в этом отношении являются нанокристаллы системы хром–ниобий.

Для проведения таких исследований необходимо иметь хорошо апробированные межатомные потенциалы, способные адекватно описывать разнообразные атомно-структурные перестройки в кристаллах, а также специально разработанные алгоритмы и программы. Эти вопросы рассматривались ранее в работах [7–11], где отработана надежная методика соответствующих компьютерных экспериментов. В настоящем сообщении проведены новые расчеты и детально изучены механизмы атомно-структурных перестроек в нанокристаллах системы хром–ниобий, что позволит лучше понять внутренние процессы, протекающие в микрослоистых композитах при глубоких степенях деформации.

Нанокристаллы хрома, ниобия и бикристаллы хром–ниобий моделировали в виде цилиндров длиной 4–5 нм и диаметром 2,0–2,5 нм с числом атомов 1168–1387. Цилиндрическую поверхность задавали с точностью до кристаллографической огранки. Растяжение осуществляли путем раздвижения атомов торцовых поверхностей. Остальные атомы вовлекались в процесс растяжения в результате их взаимодействия с атомами торцов и друг с другом. К торцовым поверхностям цилиндра (по два атомных слоя с каждой стороны) прикладывали растягивающие усилия. В зависимости от застройки кристалла продольная ось цилиндра совпадала с одним из направлений  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ , которые и были направлениями растяжения. На каждой итерации кристалл удлиняли на 0,0001 нм. Физическое время “жизни” кристалла, соответствующее одной итерации, составляло 5 фс. Следовательно, абсолютная скорость растяжения являлась постоянной и составляла  $2 \cdot 10^{-5}$  нм/фс (20 м/с), хотя относительная скорость была разная из-за неодинаковой длины образца в исходном состоянии. Как показали предварительные эксперименты, такая скорость значительно меньше скорости релаксационных процессов в решетке, обеспечивающих связность атомных перемещений. Заметим, что скорость распространения упругих волн в твердом теле лежит в интервале 2...6 км/с. Атомам нанокристаллов были заданы стохастические скорости колебаний, соответствующие температуре 300 К с интервалом термализации (поддержание температуры) 50 итераций.

Межатомные взаимодействия Cr–Cr, Nb–Nb и Cr–Nb рассчитывали методом молекулярной динамики с использованием парных потенциалов, представленных универсальной энергетической функцией, введенной в работах Роуза и др. [12, 13]:

$$U = U_0(1 + a)\exp(-a), \quad (1)$$

где  $U_0$  – энергия диссоциации парной связи. Здесь вместо предложенного Роузом выражения  $a = b(1 - Y)$  авторы записали, согласно [14, 15],

$$a = b(1 - Y) + c(1 - Y)^2 + d(1 - Y)^3, \quad (2)$$

введя в выражение для  $a$  дополнительные параметры  $c$  и  $d$ . В соотношении (2):  $Y$  – относительное расстояние,  $Y = r/r_0$ ;  $r$  – расстояние между атомами;  $r_0$  – равновесное межатомное расстояние.

Параметр  $b$  выражается через комбинацию свойств: объемный модуль упругости, энергия атомизации (сублимации) и период решетки. Параметр  $c$  определяется коэффициентом Грюнайзена [14], а параметр  $d$  регулирует дальное действие потенциала [15]. Кроме того, действие потенциала ограничено радиусом обрезания  $r_k$ , включающим взаимодействия в пределах двух координационных сфер в равновесном состоянии. Вид потенциалов представлен на рис. 1, параметры потенциалов, рассчитанные из эмпирических данных и соответствующие первопринципным расчетам [16], – в табл. 1.

Т а б л и ц а 1

Параметры парных потенциалов Cr–Cr, Nb–Nb и Cr–Nb

Потенциал	$b$	$c$	$d$	$U_0$ , эВ	$r_0$ , нм	$r_k$ , нм
Cr–Cr	5,58	2,79	5,58	–0,6345	0,262	0,350
Nb–Nb	5,19	0,64	3,11	–1,1274	0,297	0,400
Cr–Nb	4,80	–1,51	0,63	–0,8810	0,280	0,375

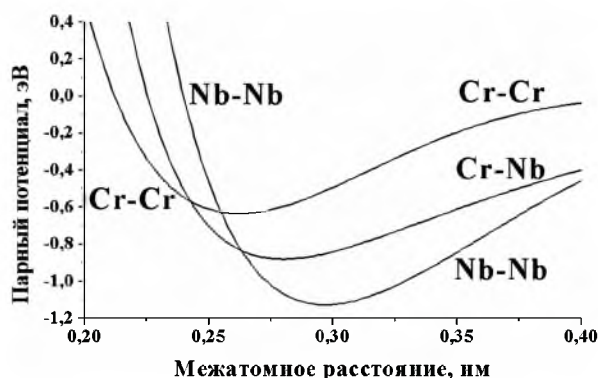


Рис. 1. Потенциалы межатомных взаимодействий Cr–Cr, Nb–Nb и Cr–Nb.

**Хром.** Вариант застройки определял общее число атомов в нанокристалле, его длину и диаметр (табл. 2). Удельная площадь внешней поверхности для представленных трех вариантов застройки составила примерно одинаковую величину:  $2,38\text{--}2,39 \text{ нм}^{-1}$ . Удельная поверхностная энергия, включающая энергию внешней поверхности и энергию межфазной границы, также была примерно одинакова:  $3,9\text{--}4,0 \text{ Дж/м}^2$ .

Начальная застройка при растяжении хрома вдоль направления  $\langle 100 \rangle$  представлена на рис. 2,а. Структурные изменения в кристалле фиксировались на каждой итерации, но в протокол записывались изменения лишь через каждые 100 итераций. Общее число итераций вплоть до разрушения составило более 20000. На рис. 2,б–д показаны характерные этапы растяжения. Растяжение до 11% приводит, на первый взгляд, к хаотическим смещениям атомов из узлов кристаллической решетки в центральной части образца (рис. 2,б).

Т а б л и ц а 2

Геометрические параметры нанокристаллов хрома

Застройка нанокристалла	Направление растяжения	Число атомов $N_a$	Длина цилиндра $L_0$ , нм	Диаметр цилиндра $D_0$ , нм	$\varepsilon_1$ , %
(100) $\perp\vec{P}$	$\langle 100 \rangle$	1380	4,33	2,08	0,0023
(110) $\perp\vec{P}$	$\langle 110 \rangle$	1350	4,49	2,06	0,0022
(111) $\perp\vec{P}$	$\langle 111 \rangle$	1387	4,66	2,05	0,0021

**Примечание.** Здесь и в табл. 3, 4:  $\vec{P}$  – усилие растяжения;  $\varepsilon_1$  – относительная деформация за одну итерацию.

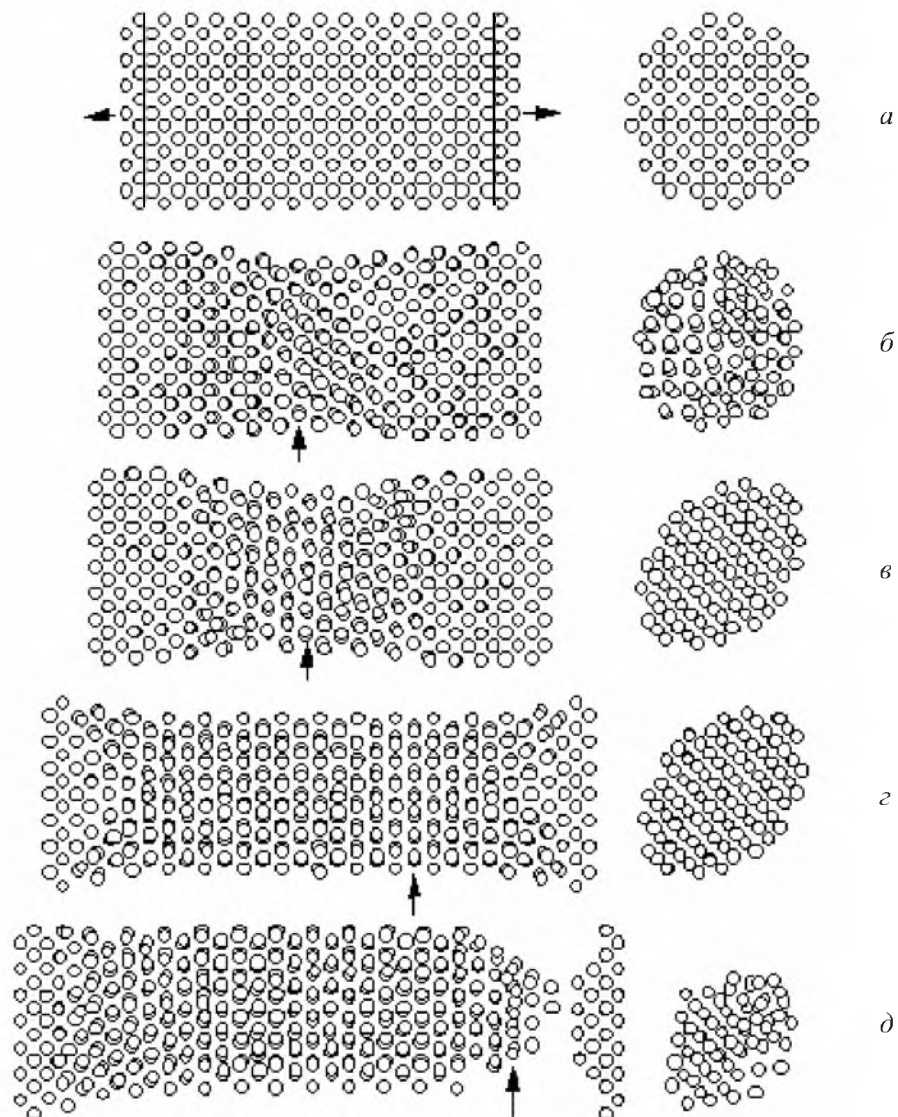


Рис. 2. Структурные изменения в нанокристалле хрома при растяжении 0 (а), 11 (б), 16 (в), 39 (г) и 58% (д) вдоль направления  $\langle 100 \rangle$ .



Однако из последующих итераций стало очевидно, что происходит целенаправленная перестройка структуры (рис. 2,в – деформация 16%), заключающаяся в переориентации плоскостей относительно действующей нагрузки. По краям осталась прежняя ориентация (она фиксирована):  $(100) \perp \vec{P}$ , т.е. перпендикулярно нагрузке  $\vec{P}$  расположены плоскости  $(100)$ , в центре ориентация изменилась:  $(110) \perp \vec{P}$ .

Это видно из сравнения поперечных сечений на рис. 2,в и 3,а, которые одинаково ориентированы к нагрузке, но развернуты относительно друг друга на  $45^\circ$  вокруг продольной оси. Заметим, что переориентация происходила без выхода атомов из плоскости поперечного сечения. Фактически в центре кристалла образовалось новое зерно, связанное с правой и левой частью образца своеобразной границей кручения.

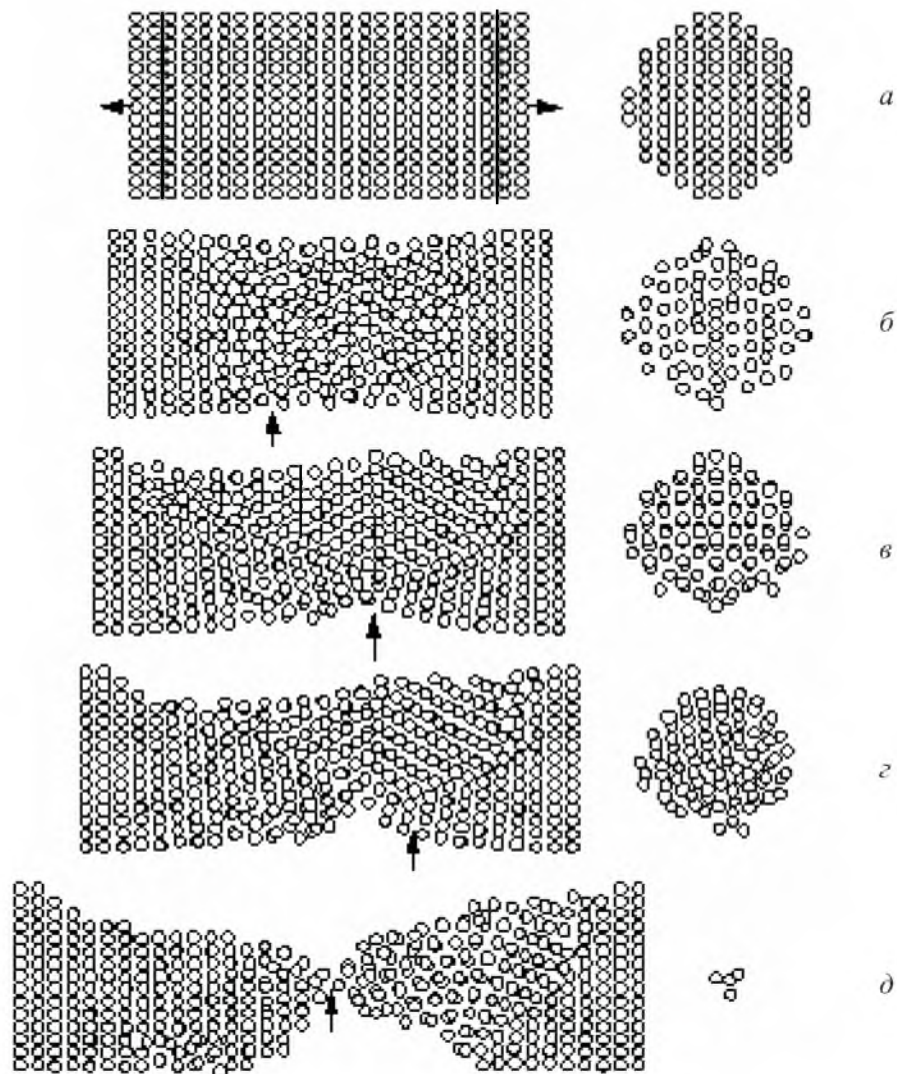


Рис. 3. Структурные изменения в нанокристалле хрома при растяжении 0 (а), 12 (б), 19 (в), 26 (з) и 60% (д) вдоль направления  $\langle 110 \rangle$ .

По сравнению с начальной застройкой (рис. 2,а) сечение на рис. 2,в приобрело овальную форму. Хотя площадь сечения уменьшилась, число атомов (89) не изменилось (ср. рис. 3,а и 2,в – справа).

В направлении большой диагонали сохранились как число атомов (11), так и расстояния между ними, тогда как в направлении малой диагонали сохранилось только число атомов (11), а расстояния уменьшились. В продольном сечении (рис. 2,в – слева) расстояния по вертикали уменьшились, а по горизонтали увеличились. Именно этот механизм (переориентация плоскостей без изменения общей ОЦК структуры) и обеспечивает деформацию растяжения: удлинения в продольном направлении и сжатия в поперечном, причем высокая устойчивость ОЦК структуры к деформации свидетельствует об адекватности выбранного потенциала. Заметим, что сечения просматриваются на глубину 0,5 нм, поэтому смещения атомов происходят на разной глубине, но проецируются на одну плоскость. Как и следовало ожидать, объемная плотность материала при растяжении почти не изменяется.

На последующих этапах растяжения (16...39%) зерно с ориентацией  $(110)\perp\bar{P}$  завоевывает все большую часть образца. Это говорит о том, что такая ориентация энергетически выгодна в данных условиях деформации (рис. 2,з – 39%). Резервы такого механизма противостояния действующему усилию без разрушения исчерпываются, когда перестройка достигает краев образца, где ориентация  $(100)\perp\bar{P}$  фиксирована. Именно на границе двух ориентаций концентрируются наибольшие напряжения, приводящие к возникновению критической трещины и разрушению (рис. 2,д – 58%).

В связи с обнаруженной переориентацией плоскостей  $(100)\rightarrow(110)$  представляло интерес проследить поведение кристалла с первоначальной застройкой  $(110)\perp\bar{P}$  (растягивающее усилие действует в направлении  $\langle 110 \rangle$  – рис. 3). В этом случае переориентация происходила сразу по нескольким направлениям (рис. 3,б – 12%), в результате чего получилась структура, показанная на рис. 3,в (деформация 19%). Видны четыре направления переориентации, в результате чего образовались зерна с большеугловыми границами и стыком. Таким образом, в отсутствие описанного механизма переориентации кристалл “вынужден искать” иные пути деформации без разрушения, а именно: переход к поликристаллическому состоянию и зерно-границные перестройки (рис. 3,в – 19% и 3,г – 26%). При этом межзеренный стык служит местом концентрации наибольших напряжений и образования зародышевой трещины, которая, развиваясь, приводит к разрушению образца (рис. 3,д – 60%). Отметим, что по мере роста напряжений в зоне разрушения происходит значительная релаксация последних вдали от трещины и восстановление исходной ориентации  $(110)\perp\bar{P}$ , что хорошо видно на рис. 3,д на продольном сечении слева от места разрушения.

Для выяснения других возможных механизмов деформации и разрушения был проведен эксперимент по растяжению образца хрома вдоль направления  $\langle 111 \rangle$  с первоначальной застройкой  $(111)\perp\bar{P}$  (рис. 4). В этом случае не наблюдается ни переориентации плоскостей, ни фрагментации кристалла на зерна. Единственным механизмом деформации являются на-

копление нарушений кристаллической структуры в локализованной области (рис. 4,б – 18,2%), быстрое зарождение и развитие кольцевой трещины (рис. 4,в – 18,4%) – всего за 0,2% деформации. Затем сечение в зоне трещины уменьшается за счет оттока атомов на достраивание плоскостей основной части материала (рис. 4,г – 34%). В результате структура по обе стороны кольцевой трещины (короткая деформационная шейка) сохраняет идеальную первоначальную застройку. Разрушение наступает при удлинении 49% (рис. 4,д), что на 9...11% раньше, чем при растяжении вдоль направлений  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$ .

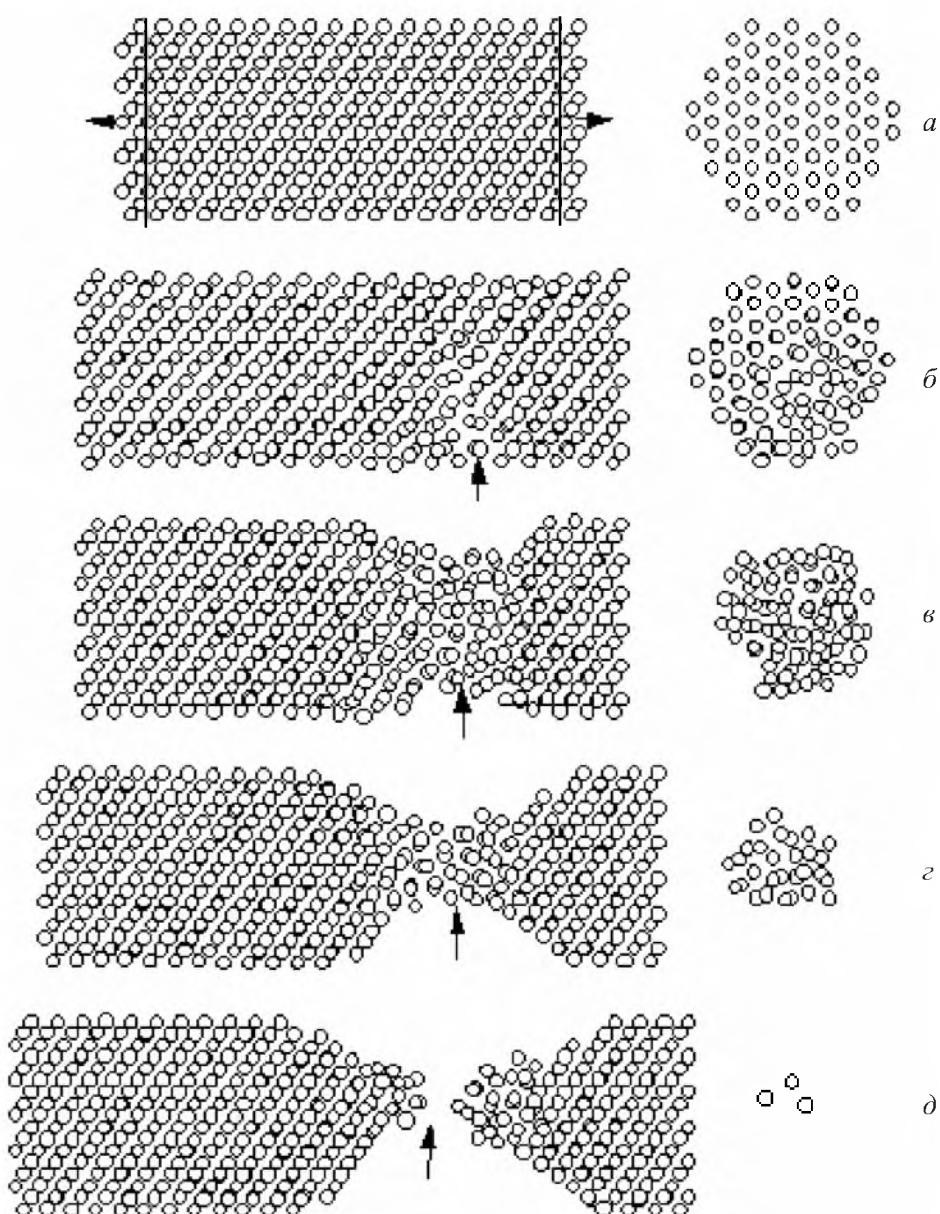


Рис. 4. Структурные изменения в нанокристалле хрома при растяжении 0 (а), 18,2 (б), 18,4 (в), 34 (г) и 49% (д) вдоль направления  $\langle 111 \rangle$ .



Казалось бы, возможным механизмом деформации при растяжении вдоль направления  $\langle 111 \rangle$  должна быть переориентация  $(111) \perp \bar{P} \rightarrow (110) \perp \bar{P}$  (аналогично растяжению вдоль направления  $\langle 100 \rangle$ :  $(100) \perp \bar{P} \rightarrow (110) \perp \bar{P}$ ). Однако переориентация плоскостей  $(100)$  происходила лишь в пределах каждой поперечной плоскости без выхода атомов из нее. Такой процесс невозможен для плоскостей  $(111)$ , поскольку необходимы перемещения атомов не только в вертикальном направлении, но и в горизонтальном. Это требует больших энергетических затрат и оказывается менее выгодным, чем хрупкое разрушение без переориентации плоскостей.

**Ниобий.** В состав многих жаропрочных материалов входит ниобий. Он обладает более высокой температурой плавления, чем хром, и в отличие от него не склонен к охрупчиванию. В свою очередь, хром обеспечивает микрослоистым композитам Cr–Nb высокую жаропрочность и жаростойкость.

Геометрические параметры нанокристаллов ниобия (табл. 3) аналогичны таковым хрома (табл. 2). Хотя число атомов ниобия и хрома одинаково для соответствующих ориентаций, размеры нанокристаллитов несколько отличаются из-за разного размера атомов и межатомных расстояний  $r_0$  в ОЦК решетках этих металлов.

Т а б л и ц а 3

Геометрические параметры нанокристаллов ниобия

Застройка нанокристалла	Направление растяжения	Число атомов $N_a$	Длина цилиндра $L_0$ , нм	Диаметр цилиндра $D_0$ , нм	$\varepsilon_1$ , %
$(100) \perp \bar{P}$	$\langle 100 \rangle$	1380	4,95	2,38	0,0020
$(110) \perp \bar{P}$	$\langle 110 \rangle$	1350	5,13	2,36	0,0019
$(111) \perp \bar{P}$	$\langle 111 \rangle$	1387	5,34	2,35	0,0019

Структурные перестройки в ниобии для растяжения вдоль направлений  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  приведены на рис. 5–7, где слева показаны продольные сечения цилиндра, справа – поперечные.

Начальная застройка для растяжения ниобия вдоль направления  $\langle 100 \rangle$  представлена на рис. 5,а. Растяжение до 10% приводит лишь к увеличению межатомных расстояний в направлении  $\langle 100 \rangle$  при незначительном их уменьшении в перпендикулярном направлении. Как и для хрома, в центральной части образца ниобия происходят смещения атомов из узлов кристаллической решетки, что приводит к перестройке структуры, а именно: переориентации плоскостей относительно действующей нагрузки (рис. 5,б – 12%). В поперечном сечении виден двойник, однако он оказывается неустойчивым и впоследствии вытесняется на поверхность, структура становится однородной (рис. 5,в – 36%). По краям у торцов осталась прежняя ориентация:  $(100) \perp \bar{P}$ , в центральной части, как и для хрома, ориентация изменилась на  $(110) \perp \bar{P}$ . Это видно из сравнения поперечных сечений на рис. 5,в и



6,а, которые одинаково ориентированы к нагрузке, но развернуты относительно друг друга на  $45^\circ$  вокруг продольной оси. Отличие состоит лишь в том, что у хрома разворот произошел по часовой стрелке, у ниобия – против нее.

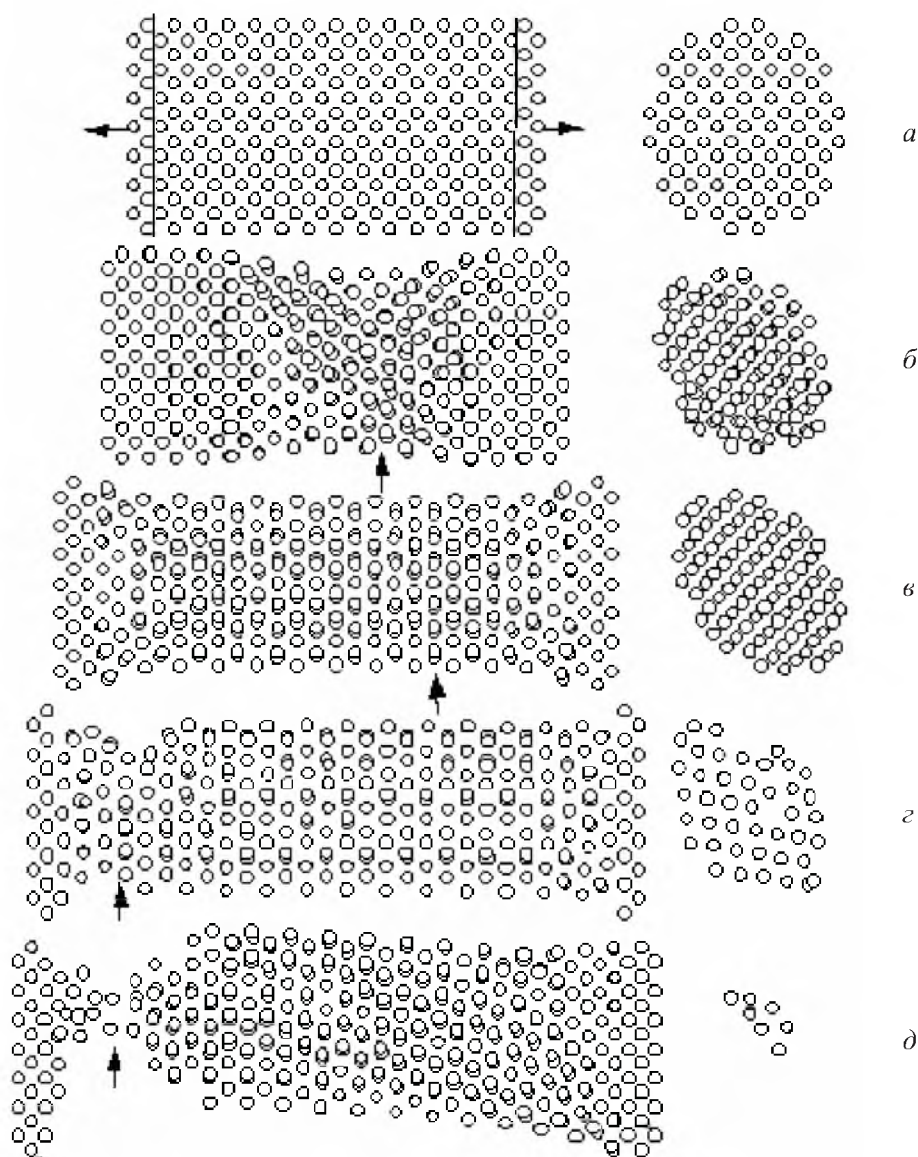


Рис. 5. Структурные изменения в нанокристалле ниобия при растяжении 0 (а), 12 (б), 36 (в), 49 (г) и 60% (д) вдоль направления  $\langle 100 \rangle$ .

Характеристики поперечных сечений ниобия аналогичны таковым хрома. По сравнению с начальной застройкой (рис. 5,а) сечение на рис. 5,в приобрело овальную форму. Хотя площадь сечения уменьшилась, число атомов в нем (89) не изменилось (ср. рис. 6,а и 5,в – справа). В направлении большой диагонали сохранилось как число атомов (11), так и расстояния между ними, тогда как в направлении малой диагонали сохранилось только

число атомов (11), а расстояния уменьшились. В продольном сечении (рис. 5, в – слева) расстояния по вертикали уменьшились, по горизонтали – увеличились. Произошла переориентация плоскостей без изменения общей ОЦК структуры, что и обеспечило деформацию растяжения. Подробнее этот механизм обсужден при рассмотрении атомно-структурных перестроек в хроме.

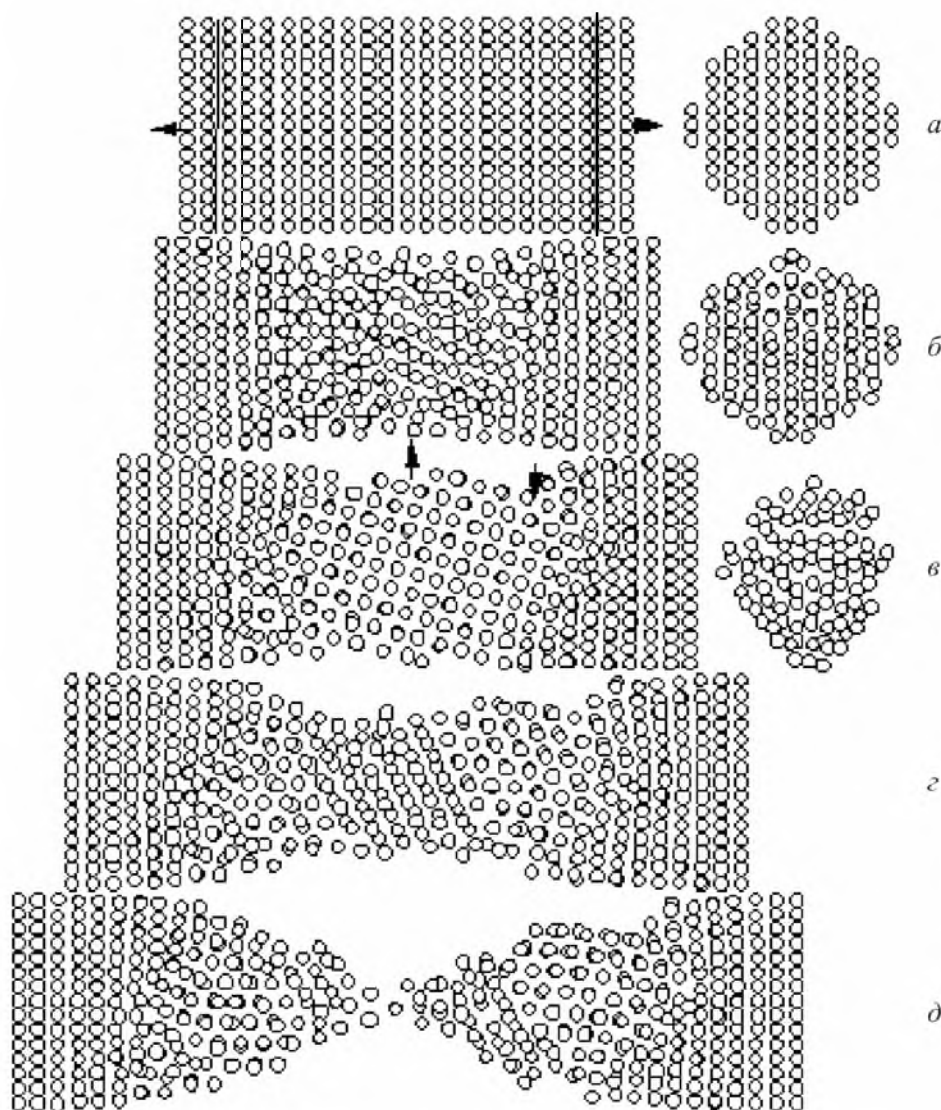


Рис. 6. Структурные изменения в нанокристалле ниобия при растяжении 0 (а), 11,9 (б), 29 (в), 52 (г) и 78% (д) вдоль направления  $\langle 110 \rangle$ .

Структурные изменения на последующих стадиях деформации аналогичны таковым в хроме, небольшие отличия имеются лишь в численных значениях степени деформации. Критическая трещина возникает при деформации 49%, а разрушение – при 60% (рис. 5, г, д).

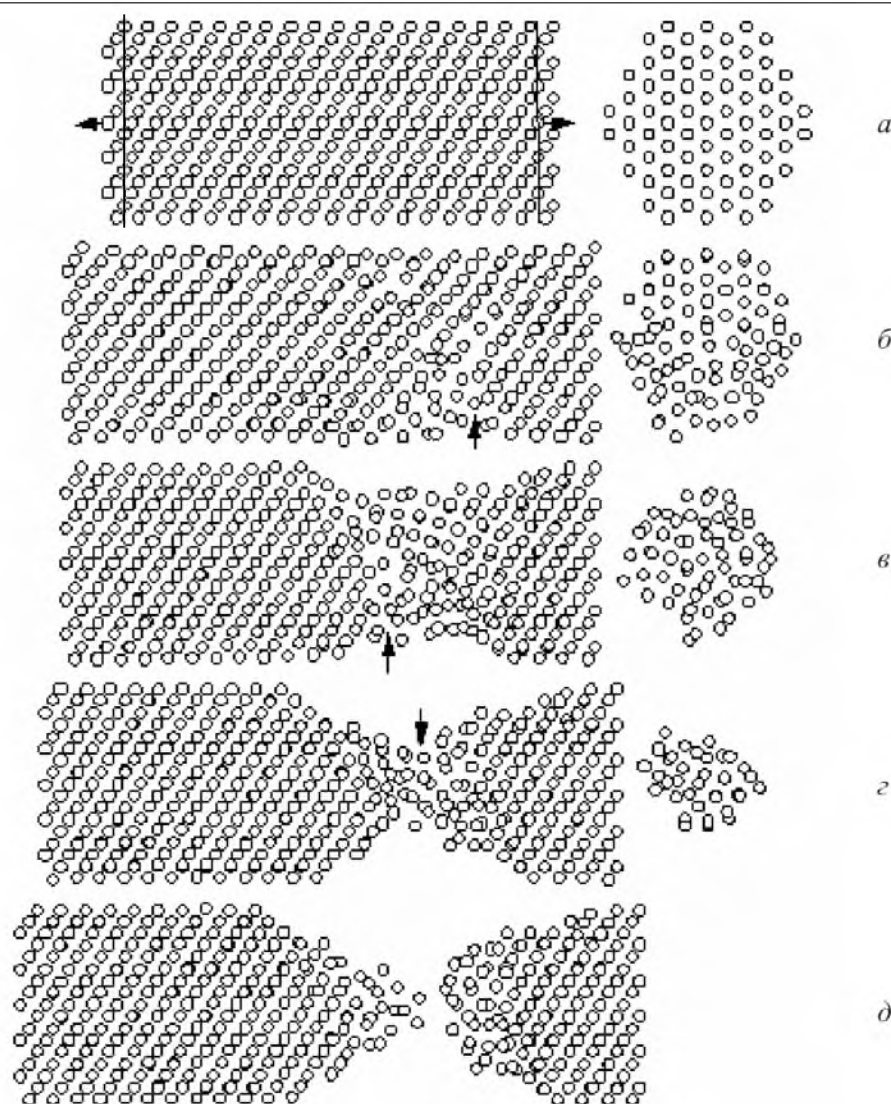


Рис. 7. Структурные изменения в нанокристалле ниобия при растяжении 0 (а), 18 (б), 18,7 (в), 28 (г) и 39% (д) вдоль направления  $\langle 111 \rangle$ .

Структурные перестройки в ниобии при растяжении вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  приведены на рис. 6. Отметим, что характер поведения ниобия и хрома отличается значительно. При деформации 11,7% наблюдались упорядоченные смещения атомов, свидетельствующие о начале расслоения плоскостей (110). Увеличение деформации лишь на 0,2% привело к лавинообразной переориентации плоскостей в центре (рис. 6,б – 11,9%). На рис. 6,в (деформация 29%) виден следующий этап этого процесса: образование плоскости (100) в центре продольного сечения, ориентированной направлением  $\langle 120 \rangle$  вдоль действия нагрузки. Такая структура остается относительно стабильной до деформации 41%, после чего в ней возникают нарушения и она перестраивается в структуру, показанную на рис. 6,г (деформация 52%). Здесь виден новый фрагмент с плоскостью (110), повернутой на  $45^\circ$  к



нагрузке  $\bar{P}$  и ограниченной с двух сторон клиновидными участками – плоскостями (100). Эти структуры имеют значительные искажения, а по краям остается нетронутой исходная застройка (110) $\perp\bar{P}$ . Дальнейшее растяжение приводит к неустойчивости плоскостей (110) в центре, и они исчезают, на их месте образуется деформационная шейка, по которой и происходит разрыв (рис. 6,д – 78%). Таким образом, при таком растяжении – (110) $\perp\bar{P}$  – происходят более разнообразные перестройки структуры, чем при начальной застройке (100) $\perp\bar{P}$ , и ресурс вязкого течения значительно выше. Это свидетельствует о большем запасе пластичности у ниобия по сравнению с хромом (на 18%).

На рис. 7 представлены данные по растяжению образца ниобия вдоль направления  $\langle 111 \rangle$  с первоначальной застройкой (111) $\perp\bar{P}$ . В этом случае поведение ниобия очень напоминает поведение хрома, отличия касаются лишь численных значений степени деформации. Не наблюдается ни переориентации плоскостей, ни фрагментации кристалла на зерна. Единственным механизмом деформации является накопление нарушений кристаллической структуры в локализованной области (рис. 7,б – 18%), быстрое зарождение и развитие кольцевой трещины (рис. 7,в – 18,7%), для чего оказывается достаточным всего 0,7% деформации. Затем сечение в зоне трещины уменьшается (рис. 7,г – 28%). Разрушение наступает при удлинении 39% (рис. 7,д), что на 21...39% раньше, чем при растяжении вдоль направлений  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$ . Объяснение этому явлению дано в разделе “Хром”.

**Хром–ниобий.** Геометрические параметры бикристаллов хром–ниобий представлены в табл. 4.

Т а б л и ц а 4

Геометрические параметры бикристаллов хром–ниобий

Застройка бикристалла	Направление растяжения	Число атомов общее (Cr+Nb)	Длина, нм, общая (Cr+Nb)	Диаметр, нм, Cr; Nb	$S_{уд}$ , нм <sup>-1</sup>	$\varepsilon_1$ , %
(100) $\perp\bar{P}$	$\langle 100 \rangle$	1168 (712 + 456)	4,63 (2,24 + 2,39)	2,080; 1,980	2,40	0,0022
(110) $\perp\bar{P}$	$\langle 110 \rangle$	1190 (702 + 488)	4,81 (2,36 + 2,45)	2,060; 2,034	2,37	0,0021
(111) $\perp\bar{P}$	$\langle 111 \rangle$	1221 (637 + 584)	3,93 (1,70 + 2,23)	2,355; 2,349	2,21	0,0025

**Примечание:**  $S_{уд}$  – удельная поверхность.

Начальная застройка для растяжения бикристалла вдоль направления  $\langle 100 \rangle$  приведена на рис. 8,а. Поперечное сечение на рис. 8,а и б (справа) дает представление о степени приближения к цилиндрической поверхности со стороны соответственно хрома и ниобия. На рис. 8,б–е показаны характерные этапы растяжения.



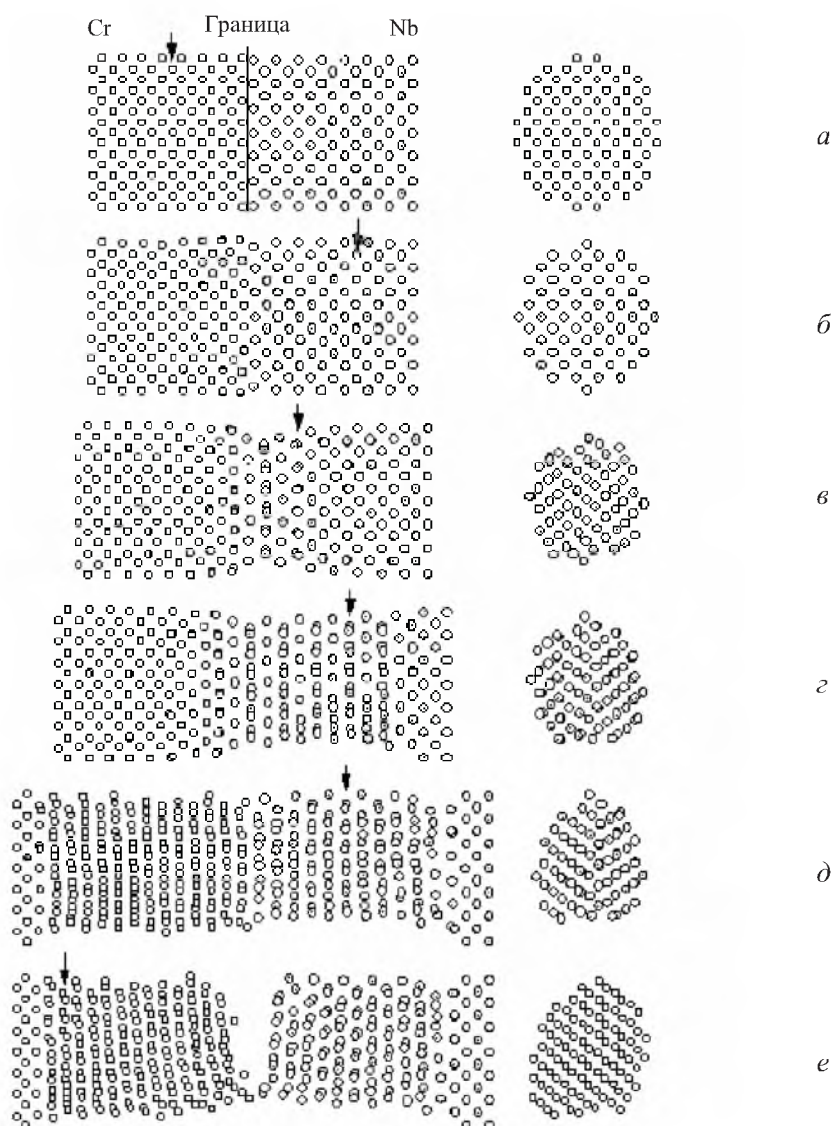


Рис. 8. Структурные изменения в бикристалле хром – ниобий при растяжении 0 (а), 0,2 (б), 9,3 (в), 21,3 (г), 47,4 (д) и 48% (е) вдоль направления  $\langle 100 \rangle$ .

Растяжение до 0,2% (рис. 8,б) приводит к соответствующему увеличению межатомных расстояний в направлении  $\langle 100 \rangle$  и подстройке атомных решеток на границе. Затем в центре продольного сечения образуется небольшая шейка деформации (рис. 8,в – 9,3%), продвигающаяся в сторону зерна ниобия (рис. 8,г – 21,3%). Таким образом, на первой стадии растяжения почти всю деформацию принимает на себя ниобий как более пластичный материал. Одновременно в нем происходят атомно-структурные перестройки: переориентация плоскостей относительно действующих усилий –  $(100) \perp \vec{P} \rightarrow (110) \perp \vec{P}$  и фрагментация кристаллита – двойникование. Двойниковые границы подвижны: видно, как две границы на рис. 8,г (21,3%) объединились в одну на рис. 8,д (47,4%).

Перестройка в хроме (вторая стадия деформации) начинается примерно с 22%, когда в зерне ниобия она охватила уже весь кристаллит, и деформация по этому механизму стала невозможной. Наблюдается эстафетная передача деформации от ниобия к хрому, причем в последнем она происходит более просто: без двойникования и фрагментации, а именно: путем однородной переориентации  $(100)\perp\bar{P} \rightarrow (110)\perp\bar{P}$  (рис. 8,е, справа). Поперечное сечение уменьшается и приобретает несколько искаженную овальную форму. Удлинение кристалла происходит за счет раздвижения атомов в горизонтальном направлении, а образовавшиеся промежутки заполняются атомами, сближающимися в вертикальном направлении. Резервы этого механизма деформации исчерпываются, когда волна перестройки в хроме достигает левой границы образца (рис. 8,е), где ориентация  $(100)\perp\bar{P}$  фиксирована. С этого момента бикристалл уже не в состоянии противостоять разрывающему усилию. Третья, заключительная стадия деформации – зарождение и развитие разрушающей трещины. Она зарождается на межфазной границе и развивается хрупко с очень большой скоростью (участок деформации 47,5...48%).

Растяжение бикристалла с начальной застройкой  $(110)\perp\bar{P}$  представлено на рис. 9. Деформация 0,2% приводит к атомной релаксации на межфазной поверхности (рис. 9,б). Пограничная плоскость ниобия сжимается, хрома – слегка растягивается и изгибается, в результате чего образуется ступенька.

При дальнейшей деформации (рис. 9,в – 9,1%) ступенька выравнивается, расстояния между плоскостями в центре продольного сечения существенно увеличиваются, достигая критической величины, после чего происходит разрыв (рис. 9,г – 9,5%). Атомы хрома и ниобия у поверхности, отдаляясь, теряют связи. В то же время в центральной части образуется мостик из атомов хрома, в который вовлекаются не только пограничные атомы, но и глубинные, выходящие по некоторым кристаллографическим направлениям.

Далее мостик утончается (рис. 9,д – 14,6%) и при деформации 34,5% происходит разрыв по межфазной поверхности (рис. 9,е), причем часть атомов хрома захватывается зерном ниобия. За все время растяжения кристаллит ниобия испытал лишь упругое растяжение (7,5% при общей деформации 9,1% – рис. 9,в), которое было снято последующей релаксацией. На рис. 9,в–е (справа) показаны структуры поперечных сечений на межфазной границе при разных степенях деформации.

Начальная застройка  $(111)\perp\bar{P}$  характеризуется несовершенствами в стыковке зерен хрома и ниобия из-за разных диаметров атомов и периодов решетки (рис. 10,а). Поэтому на начальной стадии деформации происходит подстройка структур – сопряжение плоскостей по обе стороны межфазной границы (рис. 10,б – 0,25%). Однако при дальнейшем растяжении вновь отмечаются искажения в структуре границы (рис. 10,в – 9,2%), которые служат местом концентрации напряжений. Степень повреждения быстро нарастает (рис. 10,г – 9,4%), что приводит к хрупкому разрушению путем отрыва плоскостей хрома и ниобия (рис. 10,д – 14,5%). Скол имеет ступенчатое строение с правильной кристаллографической огранкой. Внутренняя структура обоих кристаллитов не изменяется в течение всего процесса.

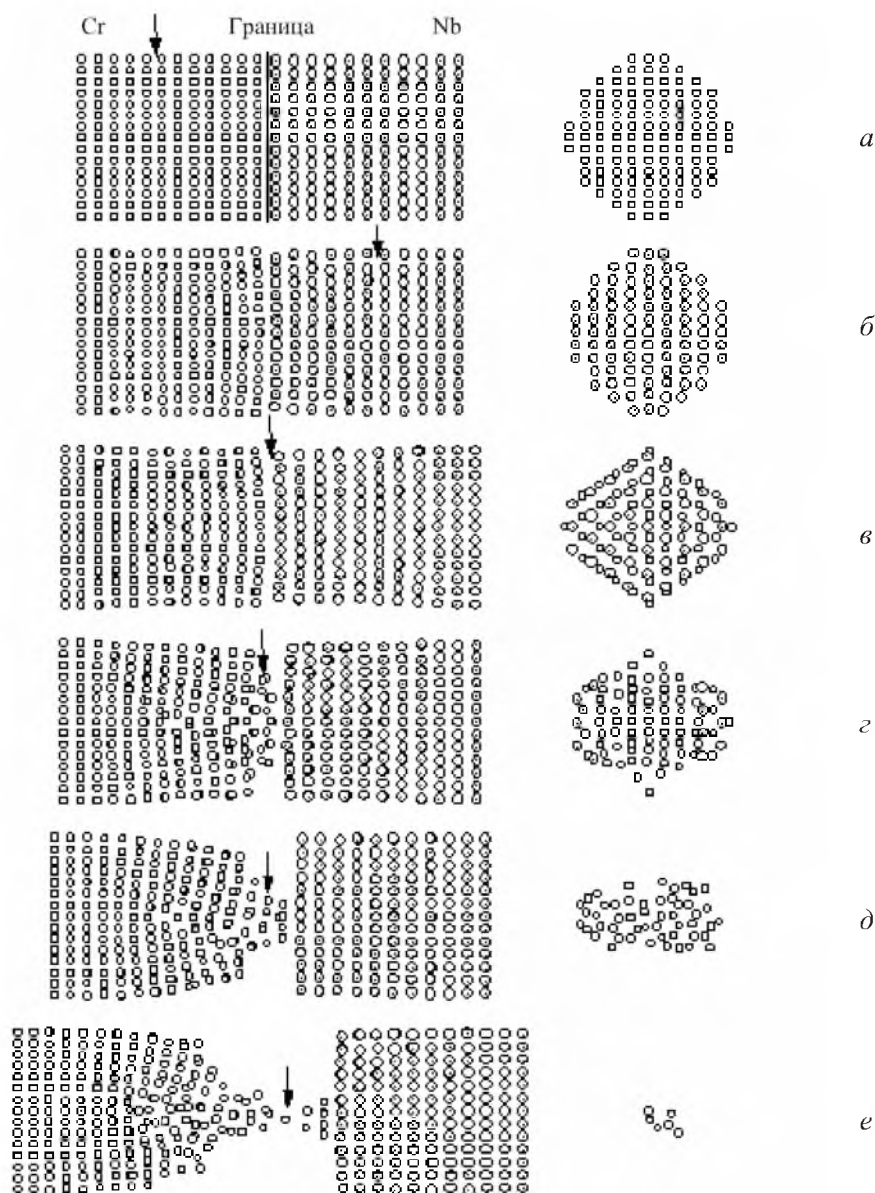


Рис. 9. Структурные изменения в бикристалле хром – ниобий при растяжении 0 (а), 0,2 (б), 9,1 (в), 9,5 (г), 14,6 (д) и 34,5% (е) вдоль направления  $\langle 110 \rangle$ .

Таким образом, конфигурация  $(111)\perp\bar{P}$  оказалась наименее долговечной (14,5% удлинения), конфигурации  $(110)\perp\bar{P}$  и  $(100)\perp\bar{P}$  (34,5 и 48% соответственно) – более долговечны. Высокая долговечность застройки  $(100)\perp\bar{P}$  обусловлена атомно-структурными перестройками в теле зерен хрома и ниобия, придающими деформации вязкопластичный характер. Тем не менее конечная стадия деформации для этой застройки протекает хрупко. Разрушение бикристалла с застройкой  $(110)\perp\bar{P}$  носит хрупковязкий характер; некоторая доля вязкости обусловлена образованием мостика из атомов хрома.

Для застройки  $(111)\perp\bar{P}$  характерно чисто хрупкое разрушение – скол. Во всех случаях разрушение наблюдалось по межфазной границе. Этот вывод согласуется с данными о низкой прочности межфазной границы в слоистых композитах Cr–Nb и необходимостью введения между хромом и ниобием дополнительной прослойки [3].

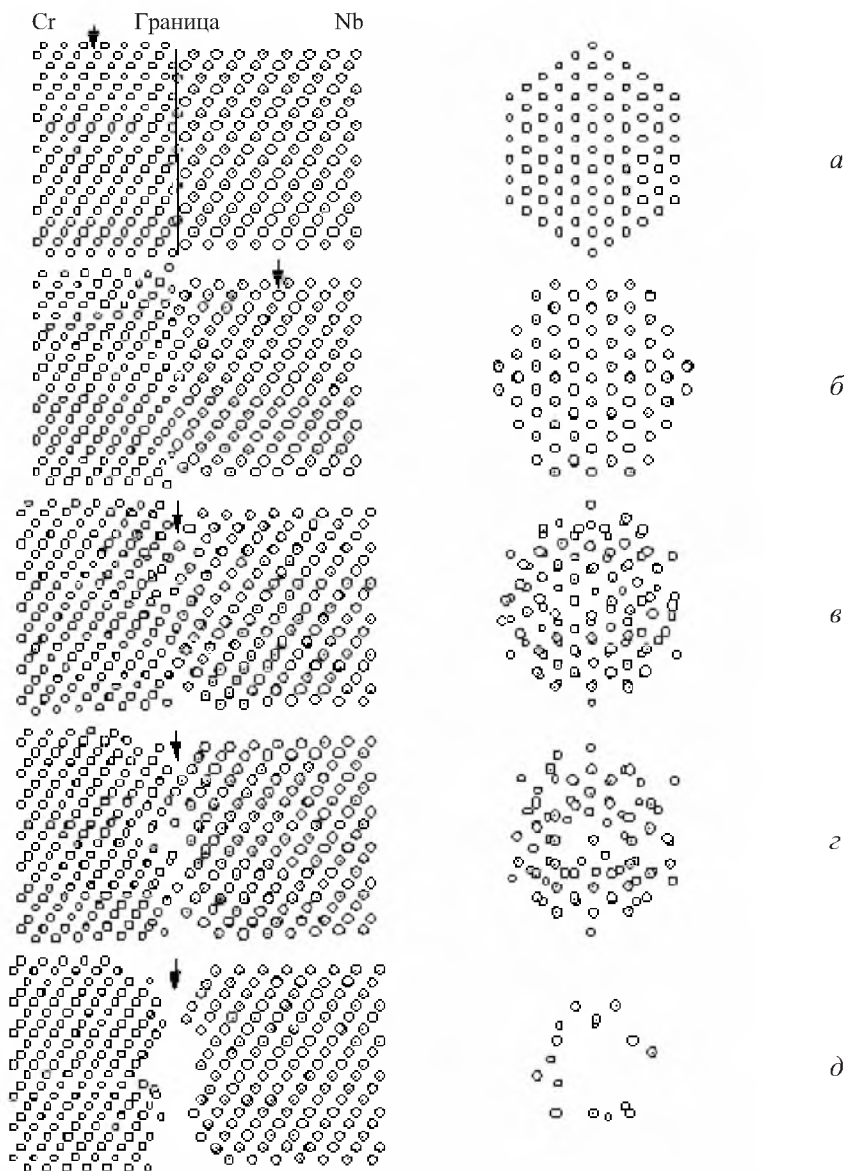


Рис. 10. Структурные изменения в бикристалле хром – ниобий при растяжении 0 (а), 0,25 (б), 9,2 (в), 9,4 (г) и 14,5% (д) вдоль направления  $\langle 111 \rangle$ .

Результаты исследования показали, что предложенные потенциалы межатомных взаимодействий выдержали проверку на адекватность. Об этом свидетельствуют такие факторы, как устойчивость ОЦК структуры к релаксационным смещениям атомов на внешней и межфазной поверхности, к



слабым тепловым колебаниям решетки (300 К), перестройкам  $(100)\perp\bar{P} \rightarrow (110)\perp\bar{P}$  и пластическим сдвигам по разным направлениям с образованием двойников, ступенчатой поверхности скола и других дефектов. Это позволяет надеяться на высокую достоверность основных полученных результатов с точки зрения их применимости к реальным нанообъектам.

Авторы не обнаружили особой склонности хрома в исследованном сверхчистом состоянии к низкотемпературному охрупчиванию, что согласуется с гипотезой о примесной природе этого явления. С другой стороны, использованные потенциалы не учитывают некоторого влияния направленных spd-гибридных связей в ОЦК решетке. Возможно, возмущение центрально-симметричного силового поля spd-гибридизацией не столь существенно, чтобы вызвать самостоятельно охрупчивание хрома при комнатной температуре.

Что касается бикристалла Cr–Nb, то свойства такого наноразмерного композита (пластичность, долговечность при 300 К) явно уступают чистым исходным металлам в основном из-за трудности передачи деформации через межфазную границу. Особенно катастрофично ведет себя граница с ориентацией  $(111)\perp\bar{P}$ , по которой происходит абсолютно хрупкое разрушение сколом. Следовательно, попытка подбора подходящей демпфирующей прослойки между хромом и ниобием при разработке микрослоистых композитов выглядит вполне логичной [3].

## Выводы

1. Проведенные компьютерные эксперименты позволили получить наглядную картину атомно-структурных перестроек при растяжении монокристаллов хрома, ниобия и бикристаллов Cr–Nb.

2. Механизм деформации монокристаллов хрома и ниобия зависит от ориентации решетки относительно растягивающего усилия  $\bar{P}$ . При начальной ориентации  $(100)\perp\bar{P}$  происходит перестройка  $(100)\perp\bar{P} \rightarrow (110)\perp\bar{P}$ . В случае  $(110)\perp\bar{P}$  наблюдаются пластические сдвиги по разным направлениям, в результате чего возникают межзеренные границы с последующей их перестройкой; напряжения концентрируются на стыке зерен, где и возникает разрушающая трещина. Исходная ориентация  $(111)\perp\bar{P}$  оказывается неспособной к пластическим сдвигам; разрушение происходит путем хрупкого скола; полное удлинение намного ниже, чем при других ориентациях хрома и ниобия.

3. В бикристаллах Cr–Nb вначале происходит подстройка атомных структур на границе хром–ниобий путем релаксационных смещений приграничных атомов. При начальной ориентации  $(100)\perp\bar{P}$  наблюдается перестройка  $(100)\perp\bar{P} \rightarrow (110)\perp\bar{P}$  сначала в ниобии, затем в хrome. В зерне ниобия образуются подвижные двойниковые границы, разрушение происходит по границе  $(100)\text{--}(110)$ . При застройке  $(110)\perp\bar{P}$  ниобий, испытывающий лишь упругую деформацию, оказывается более прочным, чем хром. В хrome имеет место пластическое течение с образованием деформационной шейки в

приграничной области, по которой и происходит разрыв. Застройка  $(111)\perp\bar{P}$  демонстрирует типично хрупкое разрушение, характеризующееся сочетанием трех параллельно протекающих процессов: упругой деформации, атомно-структурной подстройки на границе фаз и формирования ступенчатой поверхности скола.

## Резюме

У парнопотенційному наближенні проведено молекулярно-динамічне моделювання процесу розтягнення нанокристалів хрому, ніобію та бікристалів хром–ніобій. Проілюстровано атомний механізм деформації та руйнування, який залежить від орієнтації нанокристала відносно діючого зусилля  $\bar{P}$ . У разі стартової орієнтації  $(100)\perp\bar{P}$  діє механізм переорієнтації  $(100)\perp\bar{P} \rightarrow (110)\perp\bar{P}$ . У бікристалі спочатку деформується ніобій, а потім має місце естафетна передача деформації від Nb до Cr. При стартовій конфігурації  $(110)\perp\bar{P}$  спостерігається фрагментація нанокристалів та зернограничні перебудови. У бікристалі кристаліт ніобію деформується лише у межах пружної деформації; у той же час деформація збоку хрому має крихков'язкий характер. При початковій конфігурації  $(111)\perp\bar{P}$  має місце механізм крихкого руйнування. Бікристал руйнується в усіх випадках по міжфазній межі. Пояснюються причини таких атомно-структурних перетворень.

1. Шпак А. П., Куницкий Ю. А., Лысов В. И. Кластерные и наноструктурные материалы. – Киев: Академперіодика, 2002. – 539 с.
2. Шпак А. П., Куницкий Ю. А., Карбовский В. Л. Кластерные и наноструктурные материалы. – Киев: Академперіодика, 2001. – 587 с.
3. Коломиец А. Т. О возможности создания вязких жаро-коррозионных материалов на основе ОЦК тугоплавких металлов // Электронная микроскопия и прочность металлов. – Киев: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 1997. – С. 77 – 85.
4. Jeong Won Kang and Ho Jung Hwang. Molecular Dynamics Simulations Study on Ultrathin Cu Nanowires. – Chung-Ang University, Seoul, Korea. – 2002. – P. 23 – 33.
5. Van Swygenhoven H., Derlet P., Caro A., et al. Atomistic studies of plasticity in nanophase metals // Mater. Res. Soc. Symp. – 2001. – 634. – P. B5.5.1 – 12.
6. Branicio P. S., Rino J. P., Kalia R. K., et al. Molecular dynamics study of structural, mechanical, and vibrational properties of crystallite and amorphous  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$  alloy // J. Appl. Phys. – 2003. – 94. – P. 3840 – 3848.
7. Огородников В. В., Малишевский К. В. Компьютерное исследование атомного механизма деформации и разрушения бикристаллов хром–ніобій // Порошк. металлургия. – 2003. – № 1/2. – С. 82 – 91.

8. *Огородников В. В., Малишевский К. В.* Компьютерное исследование атомного механизма деформации и разрушения нанокристаллов ниобия // *Нанокристаллические материалы.* – Киев: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 2002. – С. 34 – 46.
9. *Огородников В. В., Малишевский К. В.* Компьютерное исследование атомного механизма деформации и разрушения нанокристаллов хрома // *Электронная микроскопия и прочность материалов.* – Киев: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 2001. – Вып. 11. – С. 34 – 46.
10. *Огородников В. В., Малишевский К. В.* Молекулярно-динамическое моделирование растяжения бикристалла Cr–Nb: Тр. Ин-та пробл. материаловедения НАН Украины. Сер. 2. Моделирование в материаловедении. Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. – Киев, 2001. – Вып. 5. – С. 104 – 112.
11. *Огородников В. В., Малишевский К. В.* Компьютерное моделирование процесса растяжения нанокристалла хрома: Тр. Ин-та пробл. материаловедения НАН Украины. Теория и моделирование электронного строения и свойств тугоплавких соединений, сплавов и металлов. – Киев, 1997. – С. 127 – 139.
12. *Rose J. H., Smith J. R., and Ferrante J.* Universal features of bonding in metals // *Phys. Rev. (B).* – 1983. – **28**, No. 4. – P. 1835 – 1845.
13. *Vinet P., Rose J. H., Ferrante J., and Smith J. R.* Universal features of the equation of state solids // *J. Phys. Condens. Mater.* – 1989. – **1**, No. 11. – P. 1941 – 1963.
14. *Огородников В. В.* Аналитический вывод энергетического уравнения Роуза // *Физика и техника высоких давлений.* – 1994. – **4**, № 2. – С. 15 – 24.
15. *Огородников В. В.* Изотермические уравнения состояния карбидов // *Карбиды и материалы на их основе.* – Киев: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 1995. – С. 4 – 12.
16. *Ogorodnikov V., Maliszewski K., Lisenko A., and Bekenev V.* Lattice energy, equation of state, and interatomic potential of Chromium // *Phys. Strength Plast.* – 1996. – **16**. – P. 333 – 341.

Поступила 04. 12. 2003