

Структурная трансформация нановолокна CuAu I со сверхструктурой $L1_0$ тетрагональной симметрии при одноосной деформации растяжения

Старостенков М.Д.[†], Яшин А.В.[‡], Синица Н.В.

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр-т Ленина, 46, 656038 г. Барнаул

[†]genphys@mail.ru, [‡]rubtsovsk@inbox.ru

Structural transformation in CuAu I nanowires with $L1_0$ superstructure of tetragonal symmetry at uniaxial tensile deformation

M. D. Starostenkov, A. V. Yashin, N. V. Sinitza

I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Av. 46, 656038 Barnaul, Russia

Структурно-энергетические изменения происходящие в нановолокнах упорядоченного сплава CuAu I с ГЦТ решеткой под действием одноосной деформации растяжения в направлениях $\langle 001 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ ($\langle 010 \rangle$) были исследованы методом молекулярной динамики. Путем исследования поведения графика зависимости «запасенная энергия – время деформации» выделено четыре стадии деформации: квазиупругая, пластическая, течения и разрушения. Показана анизотропия структурно-энергетических изменений происходящих в нановолокне в зависимости от ориентации направления деформации. В частности развитие стадий пластической деформации в направлении $\langle 001 \rangle$ происходит скачкообразно с образованием антифазных границ и C-доменов.

Ключевые слова: анизотропия, молекулярная динамика, деформация, нановолокно, моделирование, разрушение, дефект, энергия.

1. Введение

В научной литературе уделяется много внимания вопросам изучения наноматериалов. На сегодняшний день обнаружено большое многообразие уникальных свойств нанобъектов, которые могут найти применение при конструировании и создании новых материалов. Среди групп наноструктур и наноматериалов выделяются нановолокна и нанотрубки. Важная группа нановолокон представлена нановолокнами упорядоченных сплавов. Основные исследования металлических нановолокон сосредоточены на изучении влияния конфигурации и структуры нановолокон на физические и физико-механические свойства. Настоящая статья посвящена вопросу изучения проявлений анизотропии свойств сплавов некубической симметрии на примере

Structural and energetical changes taking place in nanowires of the CuAu I ordered alloy with FCT crystal lattice under the uniaxial tensile deformation in the directions $\langle 001 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ ($\langle 010 \rangle$) were investigated by the molecular dynamics method. Through the study of the «stored energy – deformation time» dependence the following four stages of deformation were revealed: quasi-elastic deformation, initial plastic deformation, flow and fracture. Anisotropy of structural and energetical changes observed in the nanowires depending on the orientation of tension is discussed. In particular, a jump-like development of plastic deformation accompanied by the anti-phase boundaries and C-domains formation takes place in the case of tension along the $\langle 001 \rangle$ direction.

Key words: anisotropy, molecular dynamic, deformation, nanowire, simulation, fracture, defect, energy

нановолокна CuAu I в процессе деформации при низких температурах.

2. Описание эксперимента

Эксперимент проводился на расчетном блоке, имитирующем трехмерное нановолокно CuAu I. Для расчета динамики атомной структуры был применен метод молекулярной динамики с использованием парных потенциалов Морзе [1]:

$$\phi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2), \quad (1)$$

где D – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, $\beta = e^{\alpha r_0}$, r_0 – неко-

торое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами. Взаимодействие между атомами ограничивалось тремя первыми координационными сферами. Время одной итерации при расчете методом молекулярной динамики равнялось 10^{-14} с.

Применение потенциала Морзе хорошо себя оправдывает при исследовании большинства дефектов, образующихся в ходе структурно-энергетических превращений в процессе деформации. Проведено большое число исследований поведения и свойств дефектов различного рода с использованием данного потенциала как для двумерных моделей [2-6], так и трехмерных [7, 8]. Потенциал Морзе широко применяется при исследовании таких дефектов, как границы зерен [9-11] и антифазные границы [12], которые играют большую роль в процессах деформации интерметаллидов и упорядоченных сплавов [13-16]. Были проведены исследования стабильности сплавов меди и золота при различных температурах [17-19]. Параметры устойчивой кристаллической решетки сплава CuAu I, рассчитанные для температуры 10 К в работе [19], были использованы при моделировании нановолокна в настоящей статье ($a = b = 0,3958$ нм, $c = 0,3666$ нм). Одноосная деформация растяжения расчетного блока нановолокна выполнялась по следующему алгоритму. В начале инициализировался блок в виде прямоугольного параллелепипеда с основанием в виде четырехугольника в плоскости $\{100\}$, высота параллелепипеда соответствует направлению $\langle 100 \rangle$. Для другой ориентации нановолокна прямоугольный параллелепипед задавался с основанием в плоскости $\{001\}$ и высоты в направлении $\langle 001 \rangle$. Размер расчетного блока нановолокна составлял 10368 атома, что соответствовало упаковке из 24 атомов вдоль грани в основании прямоугольного параллелепипеда $4,2352$ нм \times $4,7809$ нм и 36 атомов по его высоте $6,9611$ нм. К расчетному блоку кристалла прикладывались свободные граничные условия в направлениях $\langle 010 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$ и жесткие в направлении $\langle 100 \rangle$ для нановолокна первого типа. Для нановолокна второго типа вводились свободные граничные условия в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 010 \rangle$ и жесткие в направлении $\langle 001 \rangle$.

Динамическая одноосная деформация растяжения задавалась посредством поступательного смещения всех атомов, находящихся в пространстве между захватами

(атомами составляющими жесткие границы), вдоль оси деформации на $0,002$ нм через 10^{-13} с, что соответствует скорости деформации $3,48 \cdot 10^9$ с $^{-1}$. Компьютерный эксперимент выполнялся при температуре, соответствующей 10 К, которая задавалась через начальные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла. Для поддержания постоянной температуры применялся термостат Берендсена [20] с частотой коррекции скорости один раз в 10^{-13} с. Данный термостат применялся ранее при моделировании деформации нановолокон ГЦК металлов и сплавов в работах [21-23] и ГЦТ металлов в работе [24].

На любом этапе деформации предполагалась возможность последующего охлаждения расчетного блока до 0 К, посредством диссипации энергии за его пределы, с целью детального анализа произошедших в нем структурных изменений.

В процессе эксперимента, на каждом этапе деформации рассчитывалась запасаемая энергия, приходящаяся на отдельный атом в зависимости от времени. Был создан визуализатор наблюдения трехмерного атомного расчетного блока кристалла с возможностью поворота и выделения атомных плоскостей в заданном направлении, позволяющий наблюдать эволюцию дефектной структуры на атомном уровне.

Анализ структуры нановолокна, подвергнутого одноосной деформации растяжения, проводился на основе алгоритма, изложенного в [25]. Данный метод основывается на учете топологии связей каждого атома с ближайшими соседями. Особенный интерес при исследовании деформации нановолокон вызывает определение атомов с ГПУ топологией ближайших соседей, поскольку появление таких атомов указывает на начало значительных структурно-энергетических превращений в нановолокне и отражается на графике запасенной энергии деформации.

3. Результаты эксперимента

Для нановолокон CuAu I с ориентацией оси растяжения в направлениях $\langle 100 \rangle$ ($\langle 010 \rangle$) и $\langle 001 \rangle$ получена зависимость запасенной энергии деформации кристалла от времени растяжения. На данных графиках можно выделить четыре основных этапа структурно-энерге-

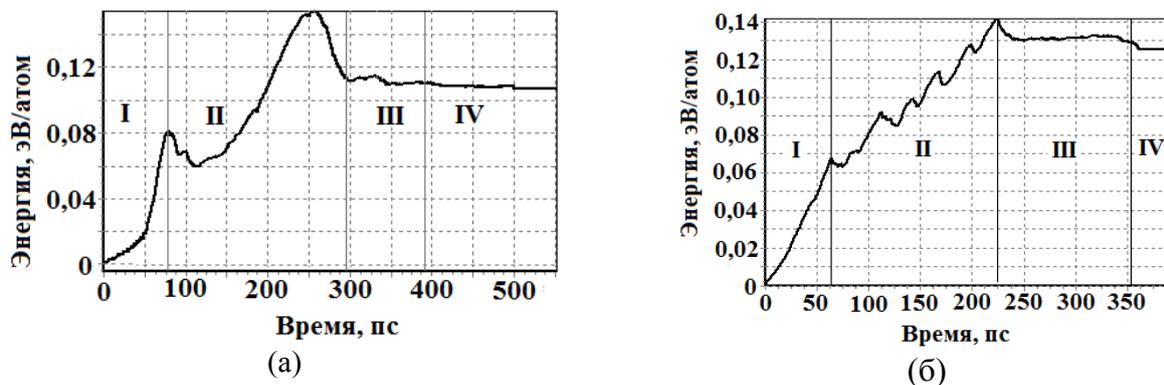


Рис. 1. Изменение запасенной энергии деформации расчетного блока нановолокна CuAu I во время структурно-энергетических превращений в процессе деформации в направлении $\langle 100 \rangle$ ($\langle 010 \rangle$) (а) и $\langle 001 \rangle$ (б)

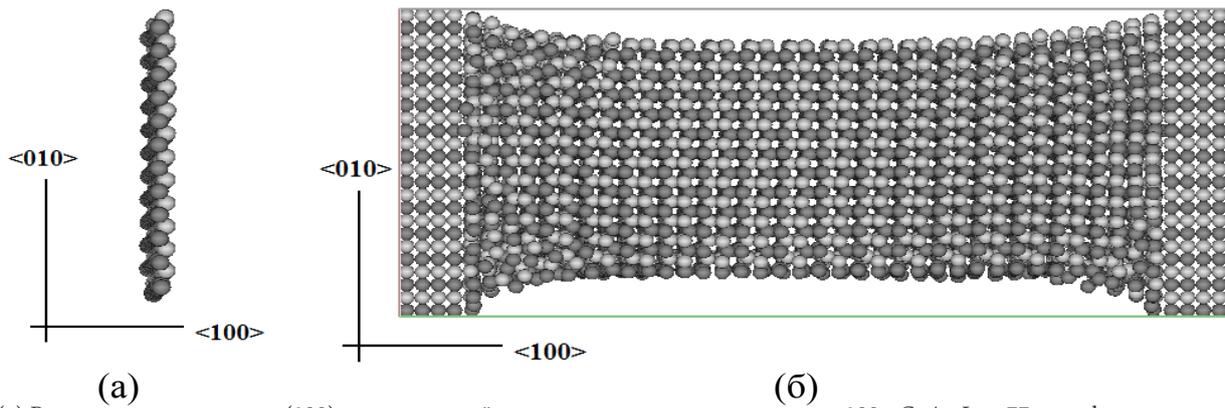


Рис. 2. (а) Расщепление плоскости (100) в центральной части нановолокна ориентации $\langle 100 \rangle$ CuAu I на 77 пс деформации на моноатомные подплоскости. (б) Нановолокно ориентации $\langle 100 \rangle$ CuAu I на 77 пс деформации.

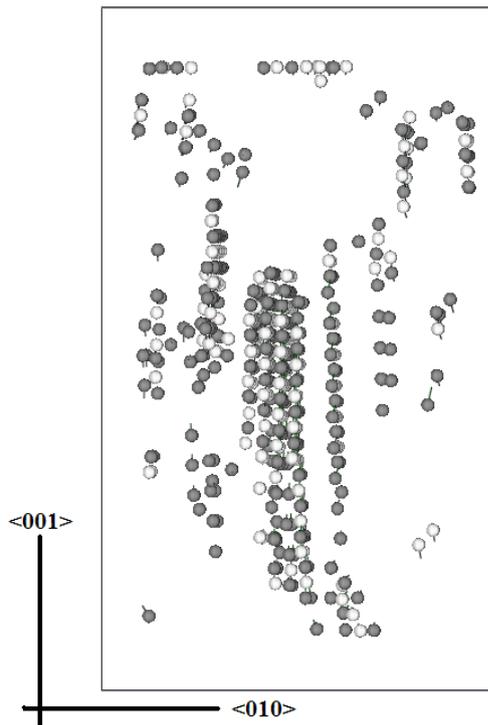


Рис. 3. Атомы с ГПУ топологией ближайших соседей в нановолокне ориентации $\langle 001 \rangle$ CuAu I на 65 пс деформации.

тических превращений: квазиупругая деформация, пластическая деформация, течение (образования шейки) и разрушение (рис. 1 а, б).

Начальный этап – это квазиупругая деформация, когда происходят небольшие смещения атомов и отсутствуют какие-либо дефекты. На данном участке графика запасаемая энергия изменяется по параболическому закону. Первая стадия завершается в точке бифуркации энергии.

Для нановолокон, деформируемых в направлении $\langle 100 \rangle$ ($\langle 010 \rangle$), точка бифуркации соответствовала величине относительной деформации 24,58% (время деформации 77 пс), в то время как для нановолокон, деформируемых в направлении $\langle 001 \rangle$ величина относительной деформации в конце первой стадии составляла 18,98 % (время деформации 63 пс). Такое отличие объясняется тем, что для нановолокна с ориентацией оси растяжения $\langle 100 \rangle$ первая стадия протекала иначе, чем для нановолокна с ориентацией главной оси нановолокна $\langle 001 \rangle$ [24]. Ввиду различия в расстояниях между атомными слоями

в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 010 \rangle$ на первой стадии наблюдалось последовательное расщепление атомных плоскостей семейства $\{100\}$ на моноатомные подплоскости (рис. 2а, б), что привело к значительному (по сравнению с ориентацией оси деформации в направлении $\langle 001 \rangle$) удлинению нановолокна на первой стадии без появления признаков пластической деформации (рис. 2 а, б).

Описанное расщепление плоскостей семейства $\{100\}$ на моноатомные наиболее интенсивно происходит в центральной части нановолокна. К окончанию первой стадии деформации расщепление плоскостей семейства $\{100\}$ начинает происходить вблизи жестких захватов, что приводит к образованию трещины на границе раздела между абсолютно жесткими захватами и расчетным блоком нановолокна. В конце первой стадии деформации вблизи захватов регистрируются значительные атомные смещения. Напряжения на захватах достигает 8,4 ГПа.

В нановолокнах, деформируемых в направлении $\langle 001 \rangle$, накопление деформирующего напряжения на первой стадии приводило к проскальзыванию участков нановолокна вдоль плоскостей $\{010\}$. Данный факт легко видеть при отображении атомов с ГПУ топологией ближайших соседей, расположенных в плоскостях, параллельных плоскости $\{010\}$ (рис. 3).

Максимальная величина деформирующего напряжения нановолокон $\langle 001 \rangle$ CuAu I в конце первой стадии составила 10,9 ГПа, что превышает аналогичный показатель для нановолокон $\langle 100 \rangle$ ($\langle 010 \rangle$) CuAu I на 2,5 ГПа (на 29,8 %).

На второй стадии деформации нановолокон CuAu I в двух основных направлениях также наблюдались отличия, которые можно объяснить проявлением ориентационной анизотропии.

В первой половине второго этапа деформации (пластической деформации) в период с 77 пс по 150 пс в нановолокнах с направлением оси растяжения $\langle 100 \rangle$ ($\langle 010 \rangle$) наблюдается поворот центральной части волокна. В центральной части выделяется домен, видимый уже на 108 пс деформации (рис. 4). Дальнейшее течение второй стадии деформации наблюдается преимущественно на границах между образовавшимися доменами. В конце второй стадии на границе между доменами вблизи левого захвата образуется «шейка». Стадия течения длится порядка 100 пс (с 298 пс по 395 пс) и представляет собой

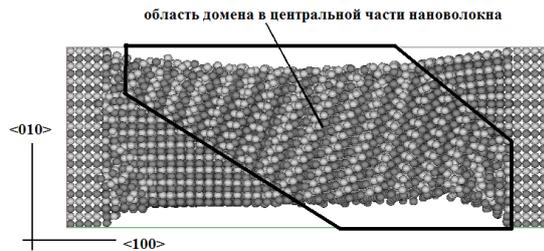


Рис. 4. Домен в центральной части нановолокна CuAu I на 108 пс деформации в направлении $\langle 100 \rangle$

скольжение двух атомных блоков по границе раздела доменов вблизи левого захвата.

Стадия пластической деформации нановолокон $\langle 001 \rangle$ CuAu I (участок II на рис. 1 б) характеризуется кривой с насыщением с несколькими точками бифуркации запасаемой энергии квазиупругой деформации. Они соответствуют появлению новых структурных и сверхструктурных дефектов и сдвигам частей нановолокна друг относительно друга. Подобная ситуация отмечена при деформации нановолокон Ni₃Al, моделируемой ранее методом молекулярной динамики [21, 22, 26]. В конце второй стадии наблюдается образование шейки (рис. 5). В ходе анализа образующихся на второй стадии дефектов выявлено образование С-доменов.

После разрушения нановолокон в компьютерном эксперименте моделировалось охлаждение атомного блока до 0 К в течении 50 пс.

В результате проведенных компьютерных расчетов для осей деформации в направлении $\langle 001 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ выявлено четыре основных этапа структурно-энергетических превращений в нановолокне CuAu I. Численные значения длительностей этапов деформации приведены в таблице 1.

Меньшая длительность первой стадии деформации указывает на более хрупкий характер структурно-энергетических превращений в нановолокне.

Сравнение длительности второго этапа деформации указывает на более пластический характер деформации нановолокон в направлении $\langle 100 \rangle$, что подтверждается более низким значением максимального напряжения на захватах в конце первой стадии для нановолокон, деформируемых в направлении $\langle 100 \rangle$.

Длительность третьего этапа деформации во многом случайна – зависит от величины минимальной площади поперечного сечения нановолокна в конце второй стадии деформации и сильно изменяется при циклировании деформации.

В результате проведенного исследования показана ориентационная анизотропия свойств сплавов некубической симметрии на примере нановолокна CuAu I, наблюдаемая при одноосной деформации растяжения при температурах близких к 0 К. Отличия протекания структурно-энергетических превращений заключались в следующем:

1. Предел текучести (максимальное напряжение на захватах в конце первой стадии деформации) был выше в нановолокнах осью деформации нановолокна в направлении $\langle 001 \rangle$, чем в $\langle 100 \rangle$ (соответственно 10,9 и 8,4 ГПа).

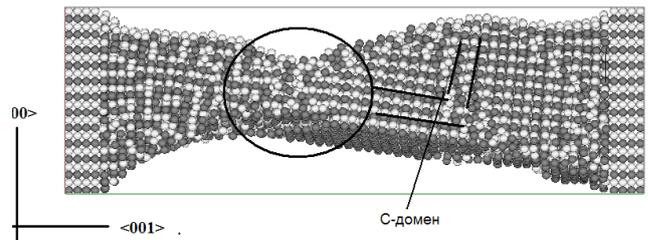


Рис. 5. Образование шейки в нановолокне ориентации $\langle 001 \rangle$ CuAu I в конце второй стадии структурно-энергетических превращений в процессе деформации на 220 пс

2. Длительность первого этапа деформации нановолокна с осью деформации в направлении $\langle 001 \rangle$ меньше, чем для нановолокна с осью деформации в направлении $\langle 100 \rangle$ (соответственно 63 и 77 пс), что указывает на хрупкий характер деформации в нановолокне с осью деформации $\langle 001 \rangle$.

3. Длительность второго этапа деформации нановолокна с осью деформации в направлении $\langle 001 \rangle$ меньше, чем для нановолокна с осью деформации в направлении $\langle 100 \rangle$ (соответственно 162 и 221 пс), что также указывает на хрупкий характер деформации в нановолокне с осью деформации $\langle 001 \rangle$ по сравнению с нановолокном с осью деформации $\langle 100 \rangle$.

4. Для нановолокна с осью деформации в направлении $\langle 100 \rangle$ обнаружены особенности структурно-энергетических превращений, не характерные для нановолокон данного сплава, деформируемых в направлении $\langle 001 \rangle$, и для нановолокон ГЦК металлов [26-27]: расщепление биатомных плоскостей семейства $\{100\}$ на первой стадии деформации, поворот центрального участка нановолокна и образования С-доменов на второй стадии деформации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке грантов РФФИ в рамках проектов №12-02-31135 мол_а, № 12-08-06055-з, №12-02-98000-р_сибирь_а, №12-01-06067-з, №12-08-98046-р_сибирь_а.

Литература

1. Tsaregorodtsev A.I., Gorlov N.V., Dem'yanov B.F., Starostenkov M.D. The Physics of Metals and Metallography. **58** (2), 336 (1984). (in Russian) [Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Физика металлов и металловедение. **58** (2), 336 (1984)].
2. Dmitriev S.V., Kozlov E.V., Lomskoy N.V., Starostenkov M.D. Russian physics journal. **3**, 73 (1997). (in Russian) [Дмитриев С.В., Козлов Э.В., Ломских Н.В., Старостенков М.Д. Изв. вузов. Физика. **3**, 73(1997)].
3. Rakitin R.Y., Poletaev G.M., Aksenov M.S., Starostenkov M.D. Technical Physics Letters. **31** (15), 44 (2005). (in Russian) [Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Письма в ЖТФ. **31**(15), 44 (2005)].
4. Andrukhnova O.V., Kozlov E.V., Dmitriev S.V., Starostenkov M.D. Solid State Physics. **39** (8) 1456 (1997). (in Russian) [Андрухова О.В., Козлов Э.В., Дмитриев С.В.,

- Старостенков М.Д. ФТТ. **39** (8), 1456(1997)].
5. Potekaev A.I., Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Mulyukov R.R., Pozhidaeva O.V., Starostenkov M.D. Russian Physics Journal. **51**(8), 858 (2008).
 6. Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Patseva Y. V. The fundamental problems of modern materials. **1** (1), 147 (2004). (in Russian) [Поletaев Г.М., Старостенков М.Д., Пацева Ю.В. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **1** (1),147 (2004)].
 7. Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Solid State Physics. **52** (6), 1075 (2010). (in Russian) [Поletaев Г.М., Старостенков М.Д. Физика твердого тела. **52**(6), 1075 (2010)].
 8. Rakitin R.Y., Poletaev G.M., Aksenov M.S., Starostenkov M.D. The fundamental problems of modern materials. **2** (2), 124 (2005). (in Russian) [Ракитин Р.Ю., Поletaев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **2**(2), 124 (2005)].
 9. Starostenkov M.D., Dem'yanov B.F., Kustov S.L., Sverdlova E.G., Grakhov E.L. Computational Materials Science. **14**(1-4), 146 (1999).
 10. Dem'yanov B.F., Kustov S.L., Starostenkov M.D. Materials Science and Engineering: A. **387-389** (1-2). 738(2004).
 11. Starostenkov M.D., Dem'yanov B.F., Weckman A.V. Surface. **4**, 54 (2000) (in Russian) [Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Векман А.В. Поверхность. **4**, 54 (2000)].
 12. Старостенков М.Д. Кристаллогеометрическое описание планарных дефектов в сверхструктурах. // Автореферат дисс. на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук в форме научного доклада. – Барнаул - АлтГТУ - 1994. - 86с.
 13. Mulyukov R.R., Starostenkov M.D. Acta Metallurgica Sinica (English Letters). **13** (1), 301(2000).
 14. Potekaev A.I., Starostenkov M.D., Sinita N.V., Yashin A.V., Narina E.G., Kulagina V.V. Russian physics journal. **54** (2), 48 (2011). (in Russian) [Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Синица Н.В., Яшин А.В., Харина Е.Г., Кулагина В.В. Известия высших учебных заведений. Физика. **54** (2), 48(2011)].
 15. Starostenkov M.D., Sinita N.V., Yashin A.V. Bulletin of the University of Tambov. Series: Natural and Technical Sciences. **15** (3), 1072 (2010). (in Russian). [Старостенков М.Д., Синица Н.В., Яшин А.В. Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. **15**(3), 1072(2010)].
 16. Potekaev A.I., Starostenkov M.D., Sinita N.V., Yashin A.V., Khoroshilov D.E. Russian physics journal. **53** (8), 47 (2010). (in Russian) [Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Синица Н.В., Яшин А.В., Хорошилов Д.Е. Известия высших учебных заведений. Физика. **53** (8), 47 (2010)].
 17. Potekaev A.I., Dudnik E.A., Starostenkov M.D., Popova L.A. Russian physics journal. **51** (10), 53 (2008)]. (in Russian) Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д., Попова Л.А. Известия высших учебных заведений. Физика. **51**(10), 53(2008)].
 18. Potekaev A.I., Dudnik E.A., Starostenkov M.D., Kulagin V.V., Myasnichenko V.S. Russian physics journal. **53** (3), 3 (2010). (in Russian) [Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Мясниченко В.С. Известия высших учебных заведений. Физика. **53**(3), 3 (2010)].
 19. Попова Л.А. Исследование атомных механизмов структурных и сверхструктурных превращений в сплаве CuAu I //Автореф. дисс. на соиск. уч. ст. к. ф.-м. н. Барнаул.-2008.-20 с.
 20. Berendsen H.J.C., et al. Molecular-dynamics with coupling to an external bath. J. Chem. Phys. **81** (8), 3684(1984).
 21. Starostenkov M.D., Yashin A.V., Dudnik E.A., Sinita N.V., Khoroshilov D.E. The fundamental problems of modern materials. **6** (1), 74 (2009) (in Russian). [Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., Синица Н.В., Хорошилов Д.Е. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **6** (1), 74(2009)].
 22. Starostenkov M.D., Yashin A.V., Dudnik E.A., Sinita N.V. Deformation and fracture of materials. **6**, 28 (2009)]. (in Russian). [Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., Синица Н.В. Деформация и разрушение материалов. **6**, 28 (2009)].
 23. Starostenkov M.D., Yashin A.V., Dudnik E.A. et al. Advanced materials. **7**, 383(2009). (in Russian) [Старостенков М. Д., Яшин А. В., Дудник Е. А. и др. Перспективные материалы. **7**, 383(2009)].
 24. Yashin A. E., Chaplygina A.A., Starostenkov M.D., Markidonov A.V. Sinita N.V., Myasnichenko V.S. Soskov A.A. The fundamental problems of modern materials. **10** (1), 93 (2013) (in Russian). Яшин А.В., Чаплыгина А.А., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Синица Н.В., Мясниченко В.С., Сосков А.А. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **10** (1), 93 (2013).
 25. Van Swygenhoven H., Farkas D., Caro A. Phys. Rev. B. - **62** (2), 831 (2000).
 26. Yashin A.V. Sinita N.V. , Dudnik E.A., Starostenkov M.D. The fundamental problems of modern materials. **5** (1), 16 (2008). (in Russian) Яшин А.В., Синица Н.В., Дудник Е.А., Старостенков М.Д. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **5** (1), 16 (2008).
 27. Yashin A.V. Sinita N.V. , Khoroshilov D.E., Starostenkov M.D., Dudnik E. A. The fundamental problem of electronic instrumentation. **8** (4), 160 (2008) (in Russian) [Яшин А.В., Синица Н.В., Хорошилов Д.Е., Старостенков М.Д., Дудник Е.А. Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения. **8** (4), 160 (2008)].