

# Исследование влияния давления на кинетику деформационно-индуцированного роста зерен двумерного нанокристалла

Корзникова Е.А.<sup>†</sup>

<sup>†</sup>elena.a.korznikova@gmail.com

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, 450001 Уфа

## Study of pressure effect on the kinetics of deformation induced grain growth in two-dimensional crystal with nanosized grains

E.A. Korznikova

Institute for Metals Superplasticity Problems RAS, Khalturin St. 39, 450001 Ufa

Методом молекулярной динамики проведено моделирование деформации сдвигом двумерного нанокристалла при трех различных уровнях гидростатического давления. В процессе деформации имел место деформационно-индуцированный рост зерен. Показано, что однозначной зависимости кинетики роста зерен от уровня давления не наблюдается, но можно показать, что со снижением уровня давления преобладающую роль начинает играть механизм роста зерен по типу взаимного разворота с последующей коалесценцией. В процессе деформации выявлено незначительное монотонное снижение уровня давления для всех трех рассмотренных случаев которое объясняется в основном снижением плотности границ зерен, а также совершенствованием структуры границ.

Ключевые слова: пластическая деформация, гидростатическое давление, рост зерен, молекулярная динамика

### 1. Введение

В настоящее время имеется очень большое число работ, посвященных исследованию измельчения зеренной структуры металла под воздействием интенсивных пластических деформаций [1-2]. Существующие методы формирования субмикроструктурных и нанокристаллических структур постоянно совершенствуются и дополняются [2-4]. Известно также, что для любых конкретных условий монотонного деформирования материала существует характерный предельный размер его структурных элементов достигаемый при определенной степени деформации и далее не меняющийся при сохранении схемы и параметров деформирования. Нужно отметить, аналогичный двухстадийный характер - рост с последующим выходом на насыщение можно отнести не только к плотности границ зерен, но также и к другим дефектам, концентрации которых также демонстрируют выход на стадию насыщения после определенной степени накопленной деформации [5-9].

Molecular dynamics simulation of shear deformation of two dimensional polycrystal subjected to three different hydrostatic pressure levels is carried out. Grain growth during plastic deformation is observed in all cases. No definite dependence of grain growth kinetics on the hydrostatic pressure level is found. On the other hand, reduction of the pressure level makes dominant the grain growth mechanism by mutual grain rotation and coalescence. A moderate monotonous decrease of pressure observed during deformation is explained by the reduction of the grain boundary density and growth of atomic order in the grain boundaries.

**Keywords:** plastic deformation, hydrostatic pressure, grain growth, molecular dynamics

Имеется достаточное количество как теоретических [10-11], так и экспериментальных [12-13] работ, где показано, что воздействие деформации в случае материала с размером зерна меньше величины, равновесной для данных условий деформирования, приводит к росту среднего размера зерна. Однако работ, посвященных исследованию влияния различных параметров деформации на кинетику и механизмы роста зерен в имеющейся литературе очень мало. Проведение подобных исследований на реальных материалах затрудняется очень сложной дефектной структурой [5-9, 12-13] и большим количеством параметров, которые необходимо учитывать. Поэтому в данном случае использование метода молекулярной динамики представляется весьма целесообразным. Можно отметить, что при моделировании пластической деформации нередко применяются методы континуальной механики [3-4], но детальное изучение атомарных механизмов миграции границ зерен требует использования атомистических подходов.

Анализ влияния давления на концентрации таких дефектов как вакансии и дислокации показал, что од-

нозначной зависимости их значений от величины гидростатической компоненты выявлено не было [14]. С одной стороны рост давления ведет к подавлению диффузионных процессов, в результате чего на начальном этапе деформации скорость накопления дефектов повышается. Однако, при этом достижение предельных значений концентраций дефектов сопровождается началом релаксационных процессов (и в некоторых случаях - динамической рекристаллизации [6,7,14]) с некоторым сопутствующим снижением количества дефектов. Так как при использовании моделирования ввиду больших скоростей деформации, вклад диффузии практически отсутствует, представляется возможным проследить динамику изменения плотности дефектов (границ зерен) без вклада диффузии, что может оказаться полезным при анализе связи между параметрами пластической деформации и формируемой в материале структурой.

В данной работе была поставлена цель оценить влияние гидростатического давления на кинетику и механизмы деформационно индуцированного роста зерен.

## 2. Модель и методика компьютерного эксперимента

Рассматривается двумерный плотноупакованный кристалл с межатомным расстоянием  $a$ . Межатомные взаимодействия описываются парным потенциалом, описанным и использованным в работах [15-19]. Расчетная ячейка с наложенными периодическими граничными условиями, включала 254747 атомов. Объем ячейки был разбит на 36 областей шестиугольной формы имеющих одинаковый размер, равный примерно 85 межатомным расстояниям, в каждом из которых задавалась определенная ориентация кристаллической решетки.

Уравнения движения атомов интегрировались с помощью метода Штормера шестого порядка с шагом интегрирования  $0,00175 t / \theta$ , где  $\theta$  - характерный период колебаний атомов.

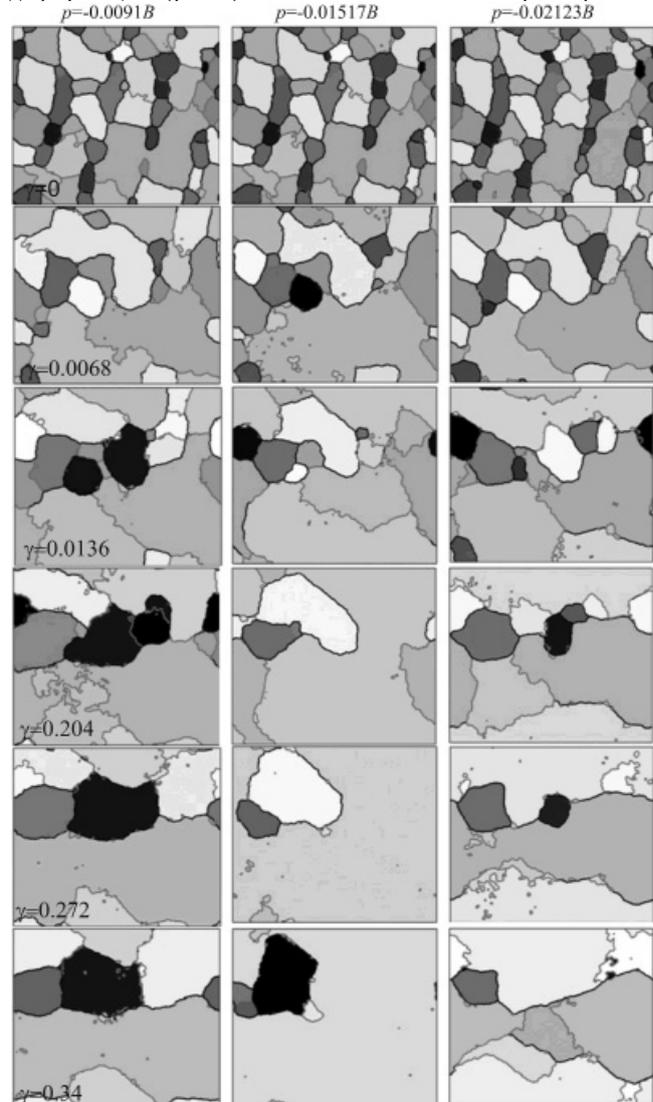
Исходная структура подвергалась предварительной сдвиговой деформации со скоростью  $\dot{\gamma} = 10^{-4} \theta^{-1}$  и степенью  $\gamma = 0,06$  при гомологической температуре  $T = 0,55 T_m$ , где  $T_m$  - температура плавления, и гидростатическом давлении  $p = -0,0091B$ , где  $B$  - объемный модуль упругости кристалла. Целью предварительной деформации являлась релаксация структуры границ зерен поликристалла.

Структура подвергалась чистому сдвигу при температуре  $T = 0,7 T_m$  и трех различных уровнях давления  $p = -0,0091B$ ;  $p = -0,01517B$ ;  $p = -0,02123B$  и постоянной скорости сдвиговой деформации равной  $\dot{\gamma} = 1,25 \cdot 10^{-5} \theta^{-1}$ . Наименьшая величина исследованных уровней давления выбрана близкой к минимальному, обеспечивающему сохранение сплошности материала при выбранном интервале температур и скорости деформации. Слишком низкое гидростатическое давление может приводить к образованию микротрещин вдоль границ зерен [16]. Контроль температуры осуществлялся с использованием термостата Носе-Хувера. Для реализации деформации чистого сдвига форма расчетной ячейки медленно

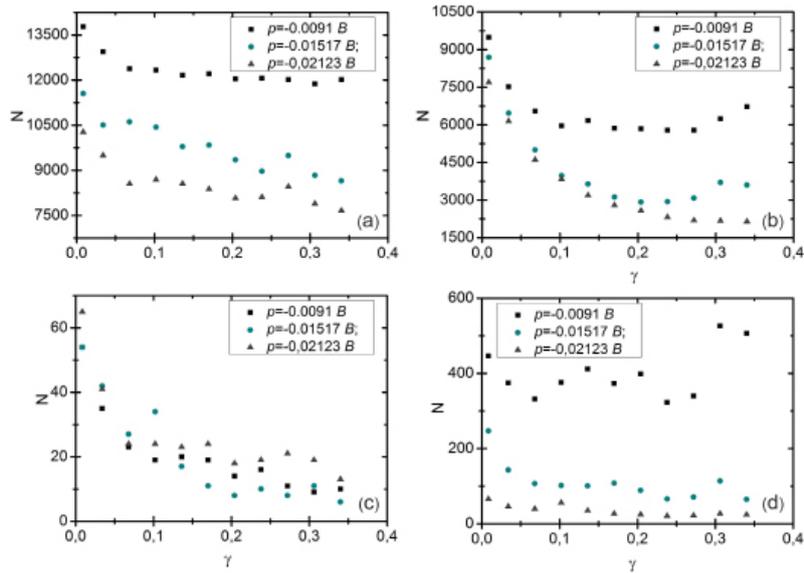
изменялась с течением времени путем увеличения угла сдвига  $\gamma$ .

## 3. Результаты и обсуждение.

На рис. 1 представлена эволюция структуры двумерного нанокристаллического агрегата в интервале степеней сдвиговой деформации  $\gamma = 0 - 0,34$  и значениях гидростатического давления  $p = -0,0091B$ ;  $p = -0,01517B$ ;  $p = -0,02123B$ . Кристаллографическая ориентация зерен (угол между плотноупакованным направлением и осью абсцисс) показана оттенками серого цвета. Черному цвету соответствует ориентация  $0^\circ$ , а белому  $60^\circ$ . Высокоугловые границы зерен с разориентацией более  $8^\circ$  показаны черным цветом, малоугловые - серым. Видно, что уже при относительно небольших степенях деформации ( $\gamma < 0,2$ ) имеет место заметный рост разме-



**Рис. 1.** Эволюция структуры поликристалла в процессе сдвиговой деформации под давлением  $p = -0,0091B$ ;  $p = -0,01517B$ ;  $p = -0,02123B$ . Кристаллографическая ориентация зерен (угол между плотноупакованным направлением и осью абсцисс) показана оттенками серого цвета. Черному цвету соответствует ориентация  $0^\circ$ , а белому  $60^\circ$ . Высокоугловые границы зерен с разориентацией более  $8^\circ$  показаны черным цветом, малоугловые - серым. На панелях правого столбца показаны значения степени сдвиговой деформации, соответствующие представленным структурам.



**Рис. 2.** Зависимости общего количества зерен (а), количества атомов с координационным числом 5 (б), количества зерен с числом атомов  $N > 3000$  (с), и количества атомов с координационными числами 3 и 4 (д) от степени сдвиговой деформации.

ра зерен с соответствующим уменьшением количества крупных зерен (количество атомов в которых  $N > 3000$ ) более чем в 2 раза (рис. 2, с). В интервале степеней деформации  $0.2 < \gamma < 0.34$  рост зерен незначителен для всех трех исследованных значений давления, что хорошо просматривается как в эволюции структуры (рис. 1) так и на графике зависимости количества крупных зерен от степени сдвиговой деформации (рис. 2, с). Нужно также отметить, что для всех трех исследованных значений давления кинетика роста зерен имеет схожий характер. Наиболее выраженный рост зерен демонстрирует структура, деформируемая под давлением  $p = -0.01517B$ .

Из рис. 2, а, где показана зависимость общего количества зерен от степени деформации очевидно, что эта характеристика обратно пропорциональна величине приложенного давления. Видно, что для наименьшего давления значение общего числа зерен демонстрирует незначительное снижение в при  $\gamma < 0.1$ , далее же значение практически постоянно. В случаях же  $p = -0.01517B$  и  $p = -0.02123B$  имеет место практически монотонное снижение общего количества зерен в исследуемой структуре. Для объяснения этого факта были построены зависимости количества дефектных атомов (с координационным числом 5 (рис. 2, б) и с координационными числами 3 и 4 (рис. 2, д)). Заметно что зависимость количества дефектных атомов в целом коррелирует с графиком на рис. 2, а. Ввиду того, что дефектные атомы располагаются в основном по границам зерен можно сделать вывод что повышение давления способствует упорядочению структуры межзеренных границ и снижению вероятности возникновения на них некоторых флуктуаций (образования зерен, состоящих из нескольких атомов, с разориентировкой, отличной от соседних зерен).

Перейдем к рассмотрению эволюции разориентировок поликристалла в процессе сдвиговой деформации, которые представлены на рис.3 (Каждая панель данного рисунка находится в соответствии с рис. 1.). В изначально созданной структуре распределение разориентировок было равномерным [17]. Бимодальный характер распределения разориентировок при  $\gamma = 0$  связан с пред-

варительной деформацией поликристалла. Рост среднего размера зерен по мере увеличения  $\gamma$  объясняет значительное снижение количества пиков на гистограммах распределения разориентировок в интервале  $0 < \alpha < 30^\circ$ , что также хорошо видно из снижения плотности высокоугловых границ в структуре (рис.1).

Как известно [20], основными механизмами роста зерен являются (1) взаимный разворот зерен с последующей коалесценцией (объединением) и (2) миграция границ. Можно выделить две основные движущие силы роста зерен. Во-первых, полная потенциальная энергия кристалла понижается при уменьшении общей длины границ зерен, поскольку они имеют повышенную энергию. Во-вторых, анизотропия кристаллической решетки приводит к тому, что зерна, по-разному ориентированные в поле действующих напряжений, имеют различную плотность энергии упругой деформации, и миграция границ будет приводить к увеличению зерен с меньшей плотностью энергии за счет зерен с большей плотностью энергии.

Для случая  $p = -0.0091B$  на начальном этапе деформации характерен рост зерен по механизму (1), что видно из постепенного слияния двух пиков вплоть до  $\gamma = 0,272$ . Дальнейшая деформация не приводит к изменению количества зерен в структуре, смещение и перераспределение пиков связано со сменой разориентировки обусловленной прохождением дислокаций (как носителей сдвига).

При давлении  $p = -0.01517B$  слияние пиков, расположенных в интервале  $\alpha = 30-45^\circ$ , говорит о действии механизма (1) – взаимном развороте с последующим слиянием. При этом дальнейший рост этого суммарного пика (после  $\gamma = 0,204$ ) с постепенным уменьшением пика на  $50^\circ$  (без сближения пиков) – признак действия механизма (2). Как уже было отмечено, скорость роста зерен для данной величины давления наибольшая, что может быть обусловлено совместным действием двух механизмов роста зерен.

При наибольшем исследованном давлении значимые изменения в размере зерен и разориентировках имеют место только до деформации  $\gamma = 0,204$ , после чего измене-

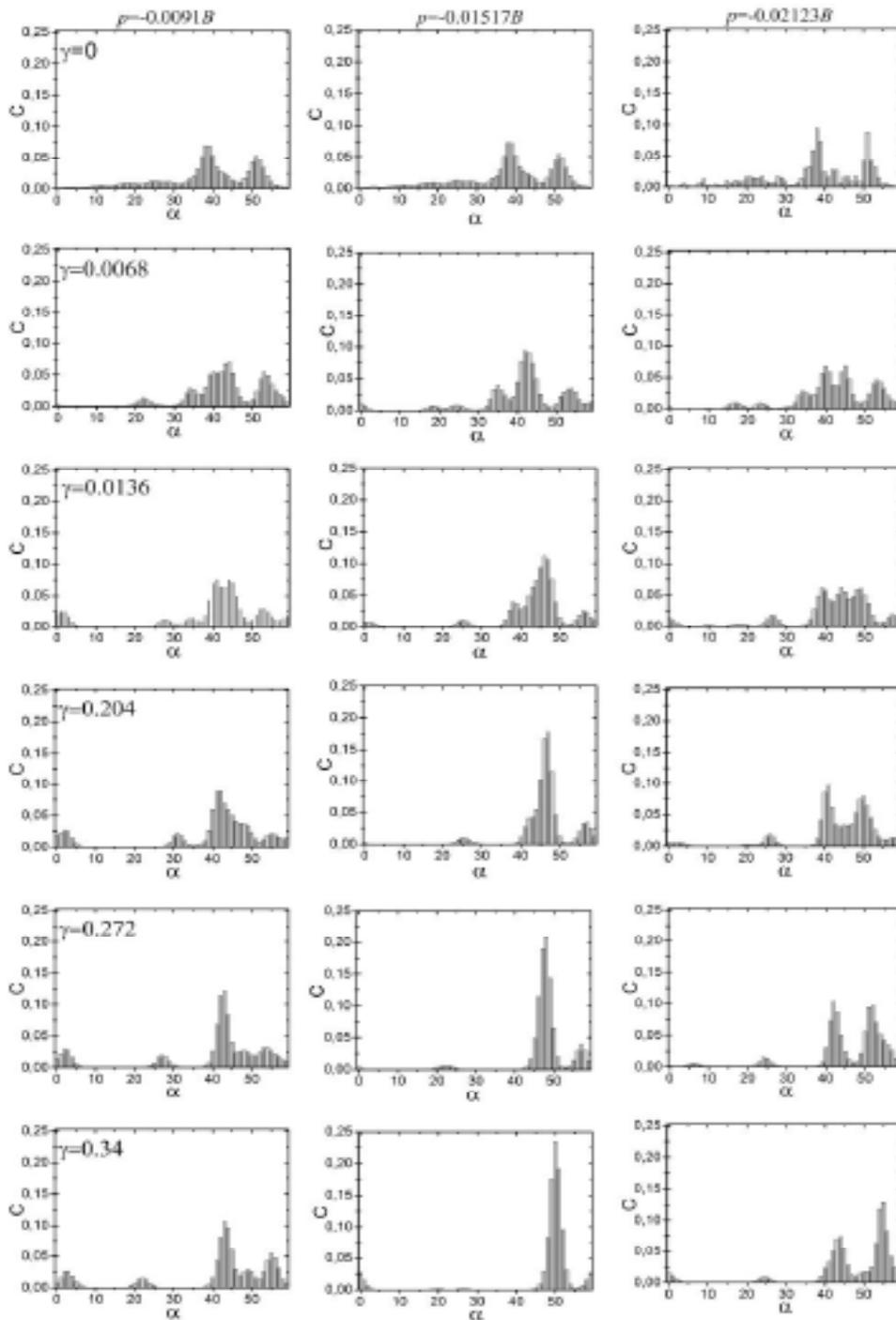


Рис. 3. Эволюция разориентировок поликристалла в процессе сдвиговой деформации. Каждая панель данного рисунка находится в соответствии с рисунком 1.

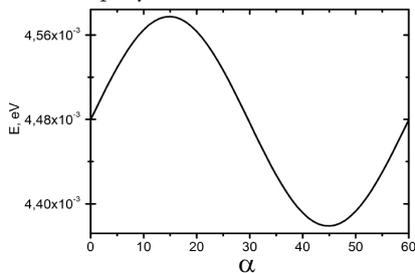


Рис. 4. Зависимость плотности потенциальной энергии монокристалла, подвергнутого упругой сдвиговой деформации, от угла между направлением сдвига и плотноупакованном направлением кристаллической решетки. Минимум плотности энергии наблюдается при  $\alpha=45^\circ$ , что согласуется с преимущественным ростом зерен, имеющих кристаллографическую ориентацию в окрестности данного значения угла (см. рис. 3).

ний этих параметров практически не наблюдается. Одним из объяснений этого может быть недостаточно высокая движущая сила роста зерен, о чем можно судить по сравнительно небольшому количеству дефектных атомов, расположенных преимущественно по границам зерен, что говорит о более низкой энергии границ.

Нужно также отметить, что преимущественная разориентировка для всех деформированных поликристаллов лежит в интервале  $30-60^\circ$ . Для анализа и выявления причин этого явления была рассчитана зависимость плотности энергии монокристалла подвинутого сдвигу от угла разворота решетки монокристалла относительно направления сдвига. Результат расчета представлен на рис. 4. Угол разворота монокристалла менялся в интервале от 0 до  $360^\circ$ . По причине того, что данная решет-

ка имеет порядок симметрии 6, функция зависимости плотности энергии от угла разворота – периодическая и на рис.4 представлен 1 период (от 0 до 60°). Как видно из данного графика минимуму плотности упругой энергии соответствует угол поворота решетки относительно направления сдвига в 45°, что объясняет преимущественное расположение разориентировок на рис. 2. Наиболее заметно данная зависимость выражена для случая  $p=-0.01517B$ .

### Выводы.

Методом молекулярной динамики проведено изучение эволюции структуры двумерного поликристаллического агрегата под воздействием сдвига при  $\gamma=0-0,34$  при трех различных уровнях гидростатического сжатия  $p=-0.0091B$ ;  $p=-0.01517B$ ;  $p=-0.02123B$ . Установлено, что

1) Во всех трех рассмотренных случаях наблюдается деформационно индуцированный рост зерен с монотонным снижением количества крупных зерен по мере роста степени деформации  $\gamma$

2) Увеличение гидростатического давления с  $p=-0.0091B$  до  $p=-0.02123B$  приводит к снижению общего количества зерен почти в 2 раза. Одним из предполагаемых объяснений этого может быть упорядочение структуры границ зерен с ростом давления, что видно из снижения количества дефектных атомов (с нарушенным координационным числом) по мере роста давления во всем рассмотренном интервале степеней деформации.

3) Со снижением уровня давления преобладающую роль начинает играть механизм роста зерен по типу взаимного разворота с последующей коалесценцией.

4) Преимущественная ориентация зерен в интервале  $30^\circ < \alpha < 60^\circ$  связана с тем, что угол разориентировки кристаллической решетки в 45° относительно направления сдвига соответствует минимуму уровня плотности упругой энергии.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 12-02-31854 мол\_а.*

### Литература

- Noskova N.I., Mulyukov R.R. UFG and nanocrystalline metals and alloys. Ekaterinburg: Ural Branch of RAS, 2003. 279 p. (in Russian) [Носкова Н.И., Мулюков Р.Р. Субмикроструктурные и нанокристаллические металлы и сплавы. Екатеринбург: УрО РАН, 2003. 279 с.]
- Markushev M.V. Letters on Materials. **1**(4), 36 (2011). (in Russian). [Маркушев М.В. К Письма о материалах. **1**(4), 36 (2011)].
- A.V. Perig, N.N. Golodenko, I.G. Zhibankov, I.I. Boiko, A.A. Sitnik. Letters on Materials. **1** (4), 217 (2011). (in Russian). [Периг А.В., Голоденко Н.Н., Жбанков Я.Г., Бойко И.И., Ситник А.А. Письма о материалах. **1** (4), 217 (2011)].
- Perig A.V., Bondarenko S.I., Bondarenko E.A. Letters on Materials. **2** (2), 103(2012). (in Russian). [Периг А.В., Бондаренко С.И., Бондаренко Е.А. Письма о материалах. **2** (2), 103(2012)].
- Korzniikova E.A., Zehetbauer M. Materialovedenie (6), 39 (2008). (in Russian) [Корзникова Е., Цехетбауэр М. Материаловедение. (6), 39 (2008)].
- Korzniikova E.A., Ditenberg I.A., Tyumentsev A.N., Korznikov A.V. Deformation and fracture of materials. (11), 8 (2010) (in Russian) [Корзникова Е.А., Дитенберг И.А., Тюменцев А.Н., Корзников А.В. Деформация и разрушение материалов. (11), 8 (2010)].
- Tyumentsev A.N., Ditenberg I.A., Denisov K.I., Korznikov A.V., Chernov V.M. Russian Physics Journal. **53** (12), 1295(2011).
- Korzniikova E.A. Letters on materials. **1** (4), 208 (2011). (in Russian) [Корзникова Е.А. Письма о материалах. **1** (4), 208 (2011)].
- Korzniikova E.A., Mironov S.Y., Korznikov A.V., Zhilyaev A.P., Langdon T.G. Mater. Sci. Eng. A. **556**, 437 (2012).
- Haslam A.J., Phillpot S.R., Wolf D., Moldovan D., Gleiter H. Materials Science and Engineering A. V. **318**, 293 (2001)
- Schiötz J. Mater. Sci. Eng. A. **375-377**, 975 (2004).
- Wen H., Zhao Y., Li Y., Ertorer O., Nesterov K., Islamgaliev R., Valiev R., Lavernia E. High-pressure torsion-induced grain growth and detwinning in cryomilled Cu powders. Philosophical Magazine **90** (34), 4541(2010).
- Liao X.Z., Kilmametov A.R., Valiev R.Z., Gao H.S., Li X.D., Mukherjee A.K., Bingert J.F. and Zhu Y.T. Deformation-induced grain rotation and growth in nanocrystalline Ni. Appl. Phys. Lett. **88**, 021909 (2006).
- Korzniikova E.A., Zehetbauer M., Schafler E. Deformation and fracture of materials. (6), 27 (2008) (in Russian) [Корзникова Е., Шафлер Э., Цехетбауэр М. Деформация и разрушение материалов. (6), 27 (2008)].
- Baimova Yu.A., Dmitriev S.V., Avtokratova E.V., Sitdikov O.Sh. Fundamental problems of modern materials. **6** (1), 42 (2009) (in Russian) [Баимова Ю.А., Дмитриев С.В., Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **6** (1), 42 (2009)].
- Kistanov A.A., Korznikov E.A., Dmitriev S.V. Fundamental problems of modern materials. **10** (4), 527 (2013). (in Russian) [Кистанов А.А., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **10** (4), 527 (2013)].
- Astanin V.V., Baimova Yu.A., Dmitriev S.V., Pshenichnik A.I. Physics of metals and metallography **113** (9), 1 (2012). (in Russian) [Астанин В.В., Баимова Ю. А., Дмитриев С. В., Пшеничнюк А. И. ФММ. **113** (9), 1 (2012)].
- Nazarova A.A., Dmitriev S.V., Baimova Yu.A., Mulyukov R.R., Nazarov A.A. The Physics of Metals and Metallography. **111**(5), 513 (2011).
- Baimova J.A., Dmitriev S.V., Nazarov A.A. Russian Physics Journal. (3-2), 14(2010) (in Russian) [Баимова Ю.А., Дмитриев С.В., Назаров А.А. Известия высших учебных заведений. Физика. (3-2), 14(2010)].
- Korzniikova E.A., Dmitriev S.V. Механизмы деформационно-индуцированного роста зерен двумерного нанокристалла при различных температурах деформации. ФММ, принято в печать.