

05

## Локальные структурные трансформации в кристаллите меди при наноиндентировании

© С.Г. Псахье, Д.С. Крыжевич, К.П. Зольников

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск  
E-mail: kost@ispms.tsc.ru

Поступило в Редакцию 4 марта 2012 г.

Проведено молекулярно-динамическое моделирование отклика кристаллита меди на атомном уровне при локальном контактном взаимодействии. Результаты расчетов показали, что зарождение и развитие пластической деформации осуществляется по механизму генерации локальных структурных трансформаций, которые, в свою очередь, формируют дефекты более высокого уровня (дислокации, дефекты упаковки, границы раздела и т.д.). В процессе нагружения сформированные дефекты структуры распространяются из зоны контакта в глубь кристаллита и при выходе на свободную поверхность приводят к ее формоизменению.

Изучение зарождения и развития пластической деформации в зонах контактного взаимодействия важно не только с точки зрения получения фундаментальных знаний о природе пластичности, но и для решения ряда практических, в том числе триботехнических, проблем. И хотя исследованию структурных дефектов в металлах и сплавах традиционно уделяется большое внимание, атомные механизмы их зарождения изучены недостаточно. Это обусловлено тем, что для детального анализа атомных перестроений при формировании дефектов необходимо высокое временное ( $\sim 10^{-12}$  s) и пространственное ( $\sim 10^{-10}$  m) разрешение. Поэтому закономерности зарождения и развития пластической деформации в последние годы активно исследуются на основе молекулярно-динамического моделирования. В последние годы многие работы посвящены моделированию поведения материалов в процессе наноиндентирования [1–3], поскольку изменение условий индентирования дает возможность направленно влиять на процесс зарождения и развития очага пластической деформации [1–6]. Цель этих работ состояла в изучении механизмов пластической деформации в

области материала под индентором, визуализации дефектных структур и интерпретации кривых нагрузка–глубина вдавливания. При этом в работах [2,3] отмечалось формирование дислокаций на начальных искажениях атомной структуры кристалла. В работе [2] для более глубокого понимания деталей поведения нагружаемого материала в неустойчивом состоянии сформулирован критерий пластичности. Он основан на анализе собственных мод малых групп атомов во всем кристаллите. Авторами показано, что их критерий пластичности, в отличие от критериев других авторов, имеет существенно нелокальную природу, что позволяет с высокой точностью описывать зарождение пластической деформации даже в области топологических дефектов, например, свободной поверхности. Влияние шероховатости поверхности медной пленки на ее отклик при наноиндентировании исследовано в статье [5]. При этом моделируемая медная пленка наносилась на две различные подложки: монокристалл алюминия или недеформируемая жесткая подложка. В свою очередь, поведение кристаллита никеля при различных скоростях вдавливания конического индентора исследовалось в работе [6].

В данной работе была поставлена задача исследовать особенности зарождения пластической деформации в монокристалле меди при нагружении протяженным (от одной грани кристаллита до другой) наноиндентором. В качестве индентора был выбран цилиндр. Такая форма и способ нагружения были выбраны с целью упрощения интерпретации результатов моделирования. При этом нагружение осуществлялось его боковой поверхностью.

Отметим, что при анализе результатов моделирования необходимо идентифицировать атомы, вовлеченные в генерацию структурных трансформаций. Для этого могут быть использованы различные параметры, которые позволяют характеризовать локальное нарушение симметрии. Наиболее часто используют следующие параметры:

1. Топологический параметр. Он представляет собой комбинацию четырех чисел для оценки топологии структурных связей выбранных атомов с ближайшими соседями [7–9]. При этом каждой паре атомов ставится в соответствие параметр, состоящий из четырех чисел. Первое число характеризует „отношения“ атомов. Оно равно 1, если эти атомы являются ближайшими соседями, и 2 — в противоположном случае. Второе число — количество общих соседей у данной пары атомов. Третье число — количество связей между общими соседями. Четвертое

число — количество связей в самой длинной непрерывной цепочке, которая проходит через общих соседей данной пары. На основе данного набора параметров можно идентифицировать топологию связей каждого атома, определяя локальный тип кристаллической решетки.

2. Центральнo-симметричный параметр [6]. Данный параметр характеризует отклонение локальной конфигурации решетки от центральной симметрии. В безразмерных единицах он может быть записан следующим образом:

$$C_i = \sum_{j=1,6} \frac{|\mathbf{R}_{ij} + \mathbf{R}_{i,j+6}|^2}{a^2}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{R}_{ij}$  и  $\mathbf{R}_{i,j+6}$  — векторы шести пар противоположно ориентированных ближайших соседей в ГЦК-решетке,  $a$  — радиус первой координационной сферы в идеальной решетке.

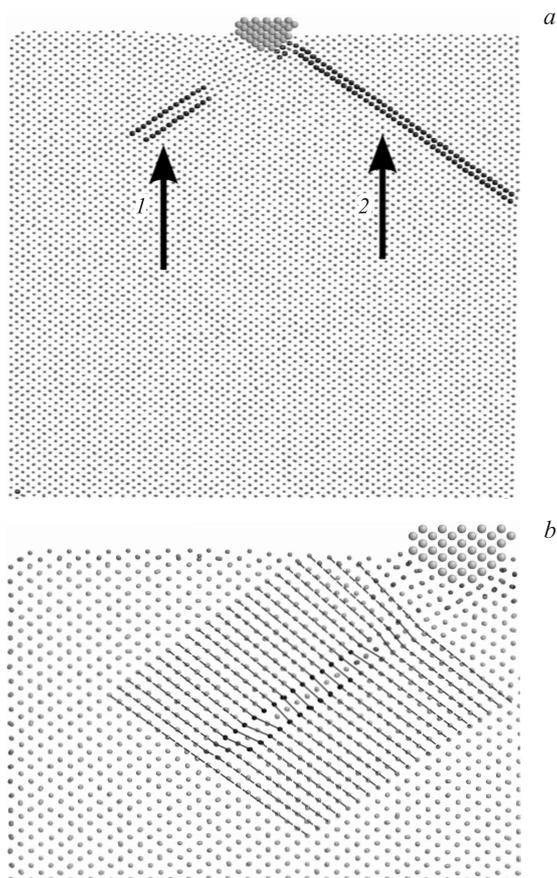
3. Вектор проскальзывания [10]. Этот параметр был предложен для контроля зарождения и развития дислокаций в условиях динамического нагружения. В безразмерном виде он определяется соотношением

$$\mathbf{P}_i = \frac{1}{N_s} \sum_{i \neq j} \frac{(\mathbf{r}^{ij} - \mathbf{r}_0^{ij})}{|\mathbf{r}_0^{ij}|}, \quad (2)$$

где  $j$  — ближайший сосед атома  $i$ ,  $N_s$  — число соседних атомов,  $\mathbf{r}^{ij}$  и  $\mathbf{r}_0^{ij}$  — векторы между положениями атомов  $i$  и  $j$  в текущем и исходном положениях соответственно.

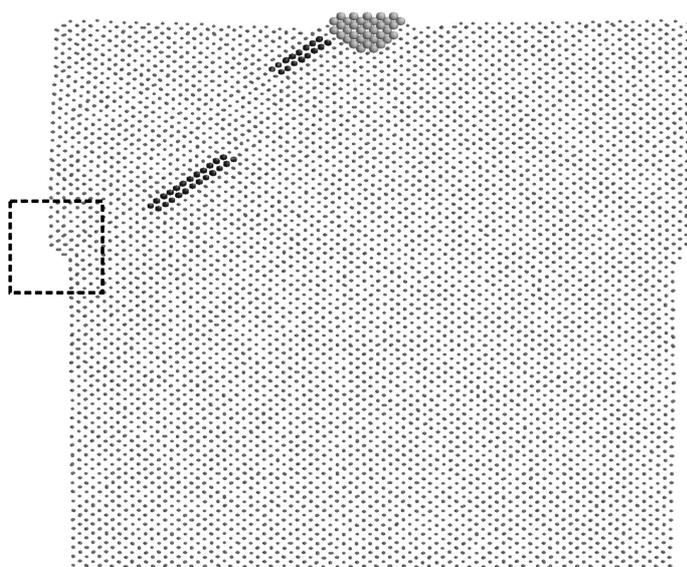
Моделируемый образец меди имел форму параллелепипеда, ребра которого были ориентированы вдоль кристаллографических направлений  $[100]$ ,  $[01\bar{1}]$  и  $[011]$ . Для описания межатомного взаимодействия использовались потенциалы, рассчитанные в приближении метода погруженного атома [11]. Протяженный индентор смещался с постоянной скоростью в направлении  $\langle 100 \rangle$  и взаимодействовал со свободной поверхностью грани  $(011)$ . Скорость движения индентора варьировалась в интервале от 5 до 50 м/с. Температура моделируемого образца составляла 300 К.

Изучение формирования и развития локальных структурных изменений на основе их идентификации с использованием топологического параметра показало, что на начальной стадии зарождения пластической деформации, которая была инициирована действием индентора, локальные структурные трансформации генерируются в зоне контакта.



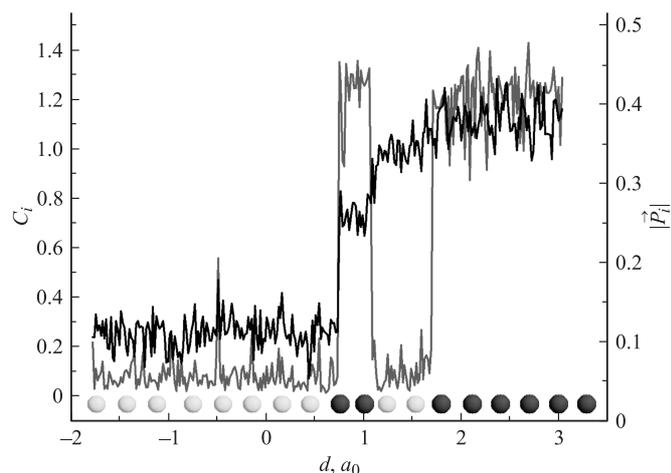
**Рис. 1.** Структура представительного слоя кристаллита в момент времени  $t = 30$  ps. 1 — дефект упаковки внедрения; 2 — дефект упаковки вычитания (a). Фрагмент структуры в момент времени  $t = 50$  ps. Линиями маркированы атомные плоскости (b).

Затем они формируют двумерные дефекты, в которые вовлечены атомы двух соседних плоскостей (121). Анализ показал, что структура данного дефекта соответствует дефекту упаковки, который „прорастает“ по направлению к боковой грани кристаллита. При этом остальная часть моделируемого образца сохраняет ГЦК-структуру.



**Рис. 2.** Структура представительного слоя кристаллита в момент времени  $t = 100$  ps, пунктирным прямоугольником отмечена сформировавшаяся ступенька на свободной поверхности.

На рис. 1, *a* показана структура нагружаемого кристаллита в момент времени  $t = 30$  ps, черным цветом выделены центры локальных структурных трансформаций (протодефекты, описанные в работах [8,9]), которые формируют плоские дефекты различного типа. На рис. 1, *a* стрелками отмечены дефекты упаковки внедрения и вычитания. Более детально структура кристаллита показана на рис. 1, *b*, где хорошо видно, что протодефекты могут образовывать как частичные, так и полные дислокации. Следует отметить, что потоки дефектов приводят к формоизменению кристаллита, в данном случае — к формированию ступенек на его гранях (рис. 2). Наблюдаемые при моделировании структурные дефекты имеют определенное сходство с элементами дефектной структуры, описанными в работе [12], где исследовались „резиноподобные“ металлы на основе титана. Высокорастворяющая просвечивающая электронная микроскопия показала, что при этом в деформированном титановом сплаве возникали планарные структурные „нановозмущения“, характеризующиеся сдвигом, значительно меньшим



**Рис. 3.** Зависимость для выбранного атома значений безразмерных параметров несферичности (серая кривая) и локального сдвига (черная кривая) от глубины индентирования ( $d$ ). Серый цвет сфер соответствует ГЦК-структуре, черный — ГПУ.

соответствующего межплоскостного атомного расстояния. Подобные структуры также наблюдались в работе [13].

Полученные в данной работе результаты позволяют исследовать возможность количественного описания локальных структурных трансформаций. С этой целью для атомов — центров локальных структурных трансформаций были вычислены параметры, определенные соотношениями (1) и (2). Для этого анализировалось изменение во времени состояния одного из атомов кристаллита. Выбор данного атома был обусловлен тем, что в процессе индентирования он испытал как прямое (ГЦК—ГПУ), так и обратное (ГПУ—ГЦК) превращение. Это превращение схематически отражено цветом сфер, расположенных вдоль оси абсцисс (рис. 3). Из рисунка видно, что оба параметра однозначно отображают наблюдаемое локальное структурное превращение. При этом необходимо отметить важное различие, которое выражается в том, что безразмерный центрально-симметричный параметр (1) позволяет идентифицировать непосредственно факт структурной трансформации, в то время как изменение величины приведенного вектора проскальзывания (2) носит „накопительный характер“. Поэтому при изучении

структурных трансформаций в процессе развития пластической деформации будет полезно использовать комплексный подход, включающий в себя анализ по обоим параметрам.

Таким образом, выбор формы индентора и проведенный анализ полученных результатов позволили явно показать, что протодефекты могут формировать дефекты более высокого ранга. Следует отметить, что как формирование, так и рост дефектов упаковки происходят по механизму генерации протодефектов. При этом развитие пластической деформации осуществляется не только генерацией протодефектов, но и их обратной трансформацией в исходную ГЦК-структуру. Сочетание этих двух процессов лежит в основе формирования и движения двумерных дефектов более высокого ранга.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований СО РАН, 2010–2012 гг., III.20.2. „Научные основы создания материалов и покрытий с неравновесными структурно-фазовыми состояниями на основе многоуровневого подхода“ и при частичной финансовой поддержке проекта РФФИ (№ 11-08-00680-а).

## Список литературы

- [1] *Gouldstone A., Chollacoop N., Dao M., Li J., Minor A.M., Shen Y.L.* // *Acta Mater.* 2007. V. 55. P. 4015.
- [2] *Miller R.E., Rodney D.* // *J. Mech. Phys. Solids.* 2008. V. 56. P. 1203.
- [3] *Delph T.J., Zimmerman J.A.* // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2010. V. 18. P. 045 008.
- [4] *Saraev D., Miller R.E.* // *Acta Mater.* 2006. V. 54. N 1. P. 161.
- [5] *Болеста А.В., Фомин В.М.* // *Физ. мезомех.* 2009. Т. 12. № 3. С. 73.
- [6] *Berke P., Tam E., Delplancke-Ogletree M.-P., Massart T.J.* // *Mechanics of Materials.* 2009. V. 41. P. 154.
- [7] *Van Swygenhoven H., Spaczer M., Caro A., Farkas D.* // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 60. P. 22.
- [8] *Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Lipnitskii A.G.* // *Phys. Lett.* 2006. V. A349. P. 509.
- [9] *Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S.* // *Phys. Lett.* 2007. V. A367. P. 250.
- [10] *Zimmerman J.A., Kelchner C.L., Klein P.A., Hamilton J.C., Foiles S.M.* // *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 87. P. 165 507.
- [11] *Daw M.S., Baskes M.I.* // *Phys. Rev.* 1984. V. B29(12). P. 6443.
- [12] *Gutkin M.Yu., Ishizaki T., Kuramoto S., Ovid'ko I.A.* // *Acta Mater.* 2006. V. 54. P. 2489.
- [13] *Тюменцев А.Н., Дутенберг И.А.* // *Физ. мезомех.* 2011. Т. 14. № 3. С. 55.