

Бездиффузионная «рекристаллизация» при большой одноосной деформации

Л.С. Метлов, А.В. Завдоев

Донецкий физико-технический институт НАНУ, ул. Р. Люксембург 72, 83114, Донецк, Украина

(Получено 09.11.2011; опубликовано online 08.05.2012)

Методом компьютерного моделирования показано, что при одноосной деформации четырехзеренной бесконечной нанопроволоки формируется укрупненные зерна с более низким содержанием дефектов. В случае растяжения была сформирована структура типа кристаллических усов. В случае сжатия наблюдалось формирование двух зерен (из четырех исходных) разориентированных под углом 4° .

Ключевые слова: молекулярная динамика, бездиффузионная «рекристаллизация», двойникование, текстура, малоугловая граница.

PACS numbers: 62.23.St; 68.55.jm

1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что в процессе интенсивной (большой) пластической деформации (ИПД), благодаря размножению дислокаций, границ зерен и др. дефектов происходит дробление (измельчение) зерен. Труднее представить, что под действием тех же силовых факторов могут протекать противоположно направленные бездиффузионные процессы в сторону укрупнения зерен, которые можно рассматривать как некоторый особый вид рекристаллизации. В последнее время развивается концепция, согласно которой процессы дробления зерен металлов и процессы рекристаллизации чередуются во времени периодически [1]. При этом активизируются новые механизмы релаксации, такие как низкотемпературная динамическая рекристаллизация [1, 2]. Полагается, что большую роль в этих процессах играет ускоренная внешними напряжениями диффузия [3]. Однако, известно, что диффузионные процессы достаточно медленны. При рекристаллизационном отжиге время обработки составляет порядка 1 час, гомогенизационного – 10 часов. Такие большие промежутки времени необходимы для того, чтобы успели реализоваться структурные перестройки. Даже, полагая ускорение диффузии на порядок, невозможно объяснить высокую скорость таких процессов. В то время как время обработки методами ИПД образцов размером десятков миллиметров составляет порядка долей секунды.

Ранее одним из авторов, методами молекулярной динамики было показано, что возможна другая бездиффузионная «рекристаллизация», осуществляемая по принципу мартенситного перехода [4]. Эксперимент был осуществлен на двухзеренной бесконечной нанопроволоке со свободными внешними границами при одноосном растяжении, то есть в условиях далеких от реальной ИПД. Границы внешних блоков при такой постановке эксперимента имели выступы, что затрудняло сопоставление с реальной ситуацией. Здесь представлены результаты моделирования на четырехзеренной нанопроволоке, сконструированной таким образом, чтобы ее внешние свободные грани не имели выступов (рис. 1 а). Эксперимент проводился как на растяжение, так и на сжатие.

В работе Тотта было отмечено, что исходная текстура образца оказывает большое влияние на процесс деформирования [5]. Им была предложена модель дробления зерен в металле при интенсивных деформациях основанной на комбинации деформационно-упрочняющейся модели и модели Тейлора с добавлением нового элемента: возможности эволюции популяции зерен посредством дробления. На примере эволюции структуры металлов ГЦК типа в наковальнях Бриджмена им было показано, что зерна, имеющие идеальную ориентировку относительно внешнего напряжения (или деформации), гораздо менее раздроблены по сравнению зернами другой ориентации. В какой-то степени эта особенность была проверена нами в компьютерном эксперименте. В нашем случае мы формируем начальную текстуру двойного типа, в которой половина зерен ориентирована под углом 90° к другой половине, т.е. 50 % «кристаллитов» находятся в идеальной ориентировке.

2. МЕТОДИКА «ЭКСПЕРИМЕНТА»

Для изучения особенностей кинетики дефектов на атомарном уровне часто прибегают к численным методам молекулярной динамики [6-7]. На этом уровне в задаче важны два аспекта – генерация и движение структурных дефектов, а также связанное с этим производство теплоты (энтропии) [8]. Здесь полагается, что частицы взаимодействуют между собой с помощью парного потенциала типа Леннард-Джонса:

$$U_{ij} = \left(\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right) \quad (1)$$

где r_{ij} – расстояние между частицами с номерами i, j . E_b , r_0 – энергия связи и равновесное расстояние между частицами в димере, соответственно. Численные оценки могут быть приведены к меди, для которой следует положить $E_b = 0.83 \cdot 10^{-19}$ Дж, $r_0 = 0.3615 \cdot 10^{-9}$ м, и $M = 1.054 \cdot 10^{-25}$ кг. Временной шаг выбран равным $\Delta t = 10^{-14}$ с, период линейных колебаний двухатомной молекулы $T = 3 \cdot 10^{-13}$ с.

Расчеты удобно вести в редуцированных единицах: $1 m_r = 0.362$ нм; $1 k_{T_r} = 1.054 \cdot 10^{-23}$ кг; $1 c_r = 0.263 \cdot 10^{-13}$ с.

В этом случае принятые в программных расчетах значения параметров будут соответствовать меди. Энергия связи в редуцированных единицах равна:

$$E_b = \frac{A}{12r_0^6} = 0.417 \cdot 10^{-4} J_r$$

В сечении ХУ модель состоит из 4х прямоугольников. Вдоль одной стороны каждого такого прямоугольника расположены 14 атомов, расстояния между которыми равны a_0 , а вдоль другой стороны 10 атомов, расстояния между которыми равны $a_0\sqrt{2}$ так, что стороны прямоугольника оказываются приблизительно равными. Это позволяет расположить их в шахматном порядке так, чтобы максимальные стороны в соседних квадратах были ориентированы взаимно ортогонально (рис. 1а). Вдоль оси Z расположены еще точно такие четыре квадрата таким образом, чтобы их атомы располагались над центрами прямоугольников предыдущего слоя на высоте $a_0/2$. Такая конструкция, будучи продолженная периодически вдоль оси Z, приведет к созданию устойчивой ГЦК структуры. Для создания устойчивой структуры достаточно ограничиться двумя такими слоями.

Таким образом, в каждом таком двухслойном квадрате будет содержаться 280 атомов и в сумме по расчетной ячейке 1120 атомов. Кроме периодических условий вдоль оси Z, периодические граничные условия накладываются вдоль вертикальной оси Y. По сумме двух квадратов период граничных условий вдоль оси Y составляет $28a_0$ или 24 атомных слоя, в то время как вдоль оси Z период состоит из двух слоев. Принцип счета основан на том, что для каждого атома высчитываются ближайшие соседи по нескольким координационным сферам и по ним идет расчет. На языке текстуры, начальное состояние системы моделируется бесконечной текстурой типа «шахматной доски». Скорость деформации, как на растяжение, так и на сжатие составляла 10^9 c^{-1} .

3. ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1 «Рекристаллизация» при одноосной растягивающей деформации

На начальной стадии при любом виде деформации общая запасенная в форме потенциальной энергии упругая энергия системы растет с ростом деформации квадратично в соответствии с законом упругого поведения (кривая 2, рис. 2). Появление дислокаций на k -ом временном шаге, что соответствует моменту времени $t = \Delta t \cdot k$, приводит к скачкообразному уменьшению потенциальной энергии. Скачок длится до момента времени $t + dt$. Начало скачка связано с появлением дислокации, а длительность – с ее движением.

Деформация образца атомарных размеров, таким образом, состоит из двух стадий – упругой стадии накопления энергии, и стадии пластического движения. Далее эти стадии могут чередоваться. Уменьшение потенциальной (упругой) энергии частично идет на создание дислокаций (энергия внутренних напряжений вокруг дислокаций), частично на увеличение

энергии теплового движения в момент зарождения и в процессе движения дислокаций, что выражается на этом графике разбросом значений самой потенциальной энергии.

После завершения пластической стадии снова наступает стадия упругого деформирования, потенциальная энергия снова в среднем возрастает также в квадратичной зависимости, но более медленно.

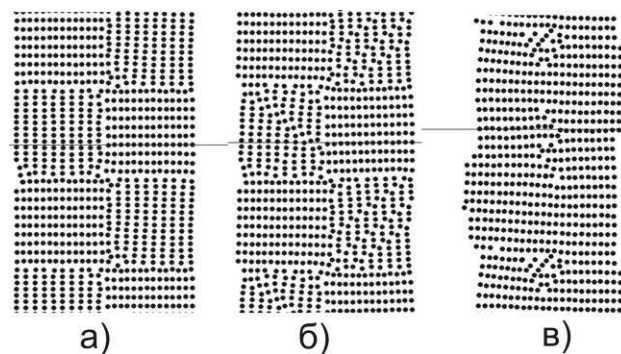


Рис. 1 – Структурные изменения на атомарном уровне при одноосной растягивающей деформации: а – начальное состояние; б, в – деформированное; steps = 423, 3259, 20755 соответственно

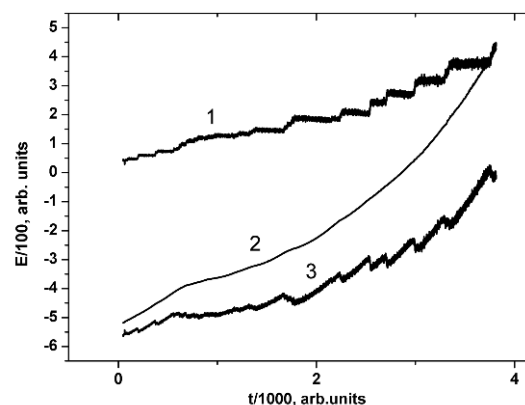


Рис. 2 – График зависимости кинетической (1), полной (2) и потенциальной (3) энергий в зависимости от времени

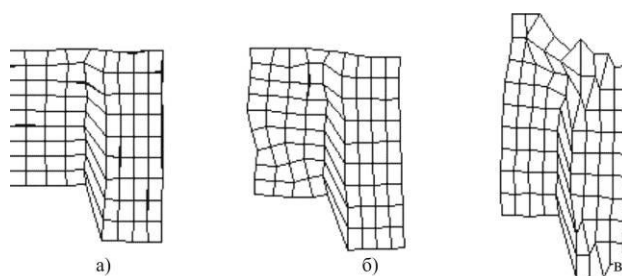


Рис. 3 – Иллюстрация сдвигового механизма перестройки структуры

На этой стадии скачок имеет меньшую величину и длится в течение большего промежутка времени. Повторный скачок происходит при меньшем уровне накопленной потенциальной энергии, что связано с активизирующей ролью тепловых флуктуаций, уровень которых вырос после первого скачка.

Стадийный характер деформирования образца

атомарных размеров прослеживается также из изменения других характеристик системы – общей внутренней (кривая 1, Рис. 2) и кинетической (кривая 3) энергии системы.

Можно отметить, что внутренняя энергия системы все время только возрастает, что связано с постоянной ее подкачкой за счет работы совершаемой над системой. Однако скорость подкачки (наклон графика) не остается постоянной и зависит от стадийности процесса и от характера протекающих в нем внутренних процессов. После каждого скачка скорость увеличения внутренней энергии уменьшается. Из этого графика также видно, что тепловые флуктуации для кинетической и потенциальной энергии осуществляются

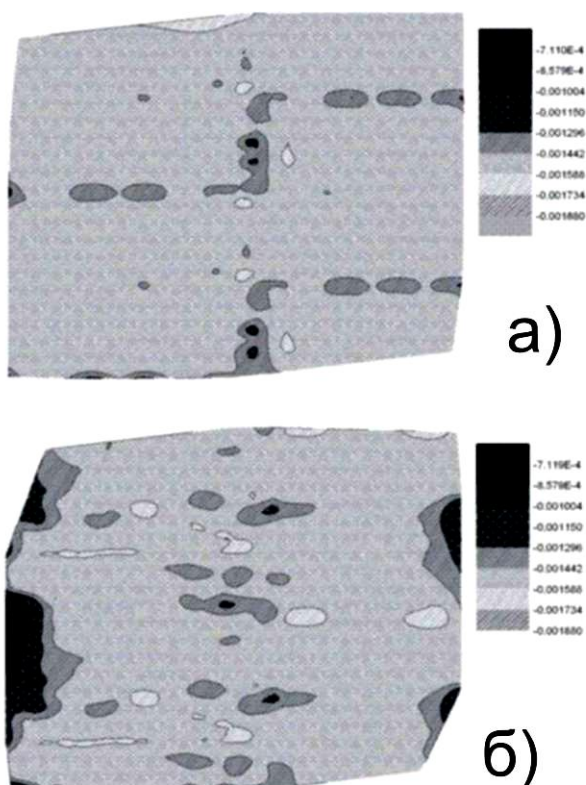


Рис. 4 – Фигуры распределения потенциальной энергии. а – исходное состояние, б – деформированное

строго в противофазе, что выражается в отсутствии флуктуаций самой внутренней энергии и свидетельствует о выполнении закона сохранения энергии.

Первая упругая стадия деформирования начинается при нулевых начальных скоростях частиц, что соответствует абсолютному нулю температур. В течение первого скачка кинетическая энергия повышается и дальше на стадии упругого деформирования остается постоянной (кривая 1 на рис. 2). Это свидетельствует об отсутствии на этой стадии диссипативных процессов в форме движения дислокаций. После скачка температура медленно повышается, что свидетельствует об упругом и пластическом деформировании на этой стадии, протекающем одновременно.

При растяжении, в материале существует предпочтительное направление, поэтому остальные кристаллиты стремятся перестроиться к этому направлению. Кристаллиты стремятся к ориентировке $\langle 100 \rangle$

при растяжении, и к ориентировке $\langle 011 \rangle$ при сжатии. Такая переориентировка возможна по разным механизмам: зернограничное проскальзывание, двойникование, мартенситный переход. В нашем случае происходит перестройка по сдвиговому механизму (путем двойникования), доказательство чего представлено на рис. 3. На данном рисунке представлена сетка, соединяющая атомы, которые были соседями в начальный момент времени (атомы, находящиеся в соседних узлах счетного массива). На рисунке видны также некоторые искажения решетки, обусловленные диффузией отдельных атомов.

Отметим, что в результате эволюции ансамбль дефектов стремится понизить свою избыточную потенциальную энергию, что легко увидеть из распределения потенциальной энергии представленного на рис. 3. Как уже отмечалось, процесс деформирования протекает стадийно, т. е. участки упругого деформирования сменяются участками пластического. Рис. 4.

3.2 «Рекристаллизация» при одноосной сжимающей деформации

Аналогичная ситуация наблюдается и при деформации сжатием, однако имеются также отличия. Так, при одноосном сжатии, на конечном этапе, формируется малоугловая граница (рис. 5г), чего не было в случае растяжения. Кроме того, после деформации сжатием формируется текстура с преимущественным преобладанием ориентировки $\langle 011 \rangle$, что согласуется с данными экспериментальных работ [8]. Аналогично ситуации с растяжением при сжатии ансамбль дефектов, также стремится к минимизации избыточной энергии, то есть, система стремится к «совершенству».

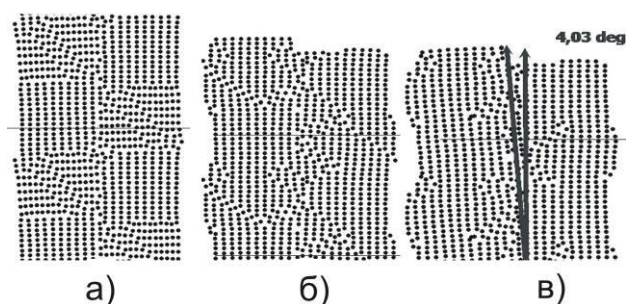


Рис. 5 – Структурные изменения на атомарном уровне при сжимающей деформации: а-в – соответствуют временным шагам 404, 6205, 15204, 16703 соответственно. Начальная стадия приведена на Рис. 1а.

Некоторые отличия присутствуют на графике зависимости потенциальной энергии, а именно, на конечной стадии деформации, наблюдается существенное увеличение кинетической энергии и одновременное падение (в глобальном смысле) потенциальной энергии, что, по всей видимости, связано с началом аморфизации (плавления) материала. В виду того, что график изменения энергий подобен случаю с растяжением, авторами он не приводится. Однако, данный эффект требует более детального изучения.

3.3 Влияние скорости деформации на структурные перестройки в материале

В данной работе, авторами также рассматривались случаи замедления скорости деформации. Так, например, при уменьшении скорости деформации в 10 раз, принципиальных отличий не наблюдается. Однако при понижении скорости на два порядка, наблюдается иная картина эволюции системы. Основное отличие заключается в том, что потенциальная энергия в принятом масштабе не меняется (Рис. 6). Такое поведение можно объяснить тем, что в случае «медленных» скоростей деформации система «мелко разгружается». Под понятием «мелкого разгрузки» подразумевается то, что аккомодация системы происходит при меньшем уровне накопленной потенциальной энергии, что связано с активирующей ролью тепловых флуктуаций, уровень которых вырос после предыдущих структурных перестроек.

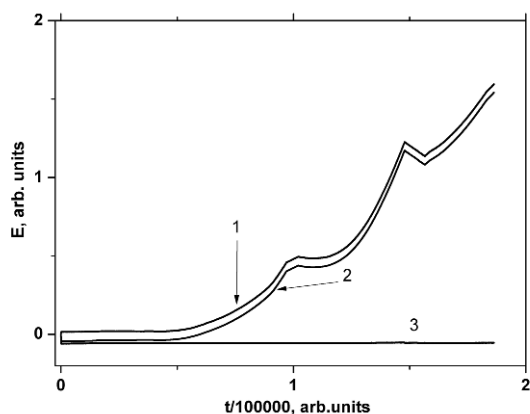


Рис. 6 – График временной зависимости кинетической (1), полной (2) и потенциальной (3) энергий (скорость деформации уменьшена в 100 раз)

«Постоянство» потенциальной энергии свидетельствует о реальном уменьшении количества внутренних дефектов в материале. Действительно, поскольку при растяжении увеличивается площадь внешней поверхности и связанная с нею энергия, то часть потенциальной энергии, приходящейся на внутренние дефекты, уменьшается. Это дает возможность экспериментальной проверки основных выводов статьи. Хорошо известно, например, что электропроводность

материала тем выше, чем выше его дефектность. Следовательно, если при увеличении деформации электропроводность начинает падать, то это будет свидетельствовать об уменьшении дефектности материала.

В плане структурной перестройки, в данном случае наблюдаются те же стадии, что и при относительно больших скоростях. Так, например, система проходит стадию образования двойников, причем они образуются в зернах, не имеющих преимущественной ориентировки. Далее идет формирование осей синфазности, которые распространяются по всей длине исследуемого объекта, как в вертикальном, так и в горизонтальном направлении. Далее наступает стадия деформации всей системы, как единого целого.

В заключение отметим также, что для этого случая на некоторых временах полная энергия системы может уменьшаться. Это свидетельствует о том, что на этих интервалах не над системой совершается работа, а сама система совершает работу над «внешними телами». Микроскопические механизмы такого поведения пока не ясны, и требуют более детального изучения в будущем.

4. ВЫВОДЫ

Было показано, что в обоих случаях путем перехода типа мартенситного формируется укрупненные зерна с более низким содержанием дефектов меньшей по сравнению с границами зерен размерностью. В случае растяжения была сформирована структура типа кристаллических усов. Перестройка структуры при одноосном сжатии завершилась формированием двух разориентированных под углом 4° зерен (из четырех исходных).

Показана принципиальная возможность «бездиффузионной» структурной перестройки по сдвиговому механизму (путем двойникования) при деформации нанообъекта одноосной нагрузкой.

Также показано влияние скорости деформации на поведение системы деформируемых нанозерен. При более низких скоростях деформации аккомодация системы происходит при меньшем уровне накопленной потенциальной энергии.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарности д.т.н. Пашинской Е.Г. и д.т.н. Константиновой Т.Е., за обсуждение некоторых моментов работы и отдельные замечания.

Diffusion-Less Recrystallization at High Uniaxial Deformation

L.S. Metlov, A.V. Zavidovcev

Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O.Galkin NASU,
72 R. Luxembourg Str., Donetsk, 83114, Ukraine

It was shown by computer simulation that coarsened grains with lower content of defects are formed at uniaxial deformation of a four-grain infinite nano-wire. The structure similar to crystal filaments was formed in the case of tension. The case of compression demonstrated formation of two grains (from four initial ones) disoriented at an angle of four degrees.

Keywords: Molecular dynamics, Diffusion-less "recrystallization", Twinning, Texture, Low-angle boundaries.

Бездифузійна «рекристалізація» за великої одноосьової деформації

Л.С. Метлов, О.В. Завдовеев

Донецький фізико-технічний інститут НАНУ, вул. Р. Люксембург 72, 83114, Донецьк, Україна

Методом комп'ютерного моделювання показано, що за наявності одноосьової деформації чотирьох-зернового нескінченного нанодоту формуються укрупнені зерна з більш низьким вмістом дефектів. У разі розтягнення була сформована структура типу кристалічних вусів. У разі стиснення спостерігалося формування двох зерен (з чотирьох вихідних) розорієнтованих під кутом 4° .

Ключові слова: молекулярна динаміка, бездифузійна «рекристалізація», двійникування, текстура, малокутова границя.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. А.М. Глезер, *Известия РАН*, **71** № 12 1767 (2007).
2. А.М. Глезер, Л.С. Метлов, *ФТТ* **52**, № 6 1090 (2010).
3. Я.С. Уманский, Б.Н. Финкельштейн, М.Е. Блантер, *Физические основы металловедения* (Москва: Металлургиздат: 1949).
4. Л.С. Метлов, Н.Н. Белоусов, А.Б. Дугатко, *ФТВД* **15**, № 2 38 (2005).
5. L.S. Toth, Yu. Estrin, R. Lapovok, C. Gub, *Acta Mater.* **58**, 1782 (2010).
6. D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulations. From algorithms to applications* (San Diego, San Francisco, New York, Boston, London, Sydney, Tokyo: Academic Press: 2002).
7. L.S. Metlov, *Phys. Rev. E* **81**, 051121 (2010).
8. Г. Вассерман, И. Гревен, *Текстуры металлических материалов*, (Москва: пер. с нем., 2 изд.: 1969).