ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ

УДК 669.1:539.213:539.214

ПЛАСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА ЖЕЛЕЗА В УСЛОВИЯХ ОДНООСНОГО РАСТЯЖЕНИЯ

© 2019 г. А. Т. Косилов^{*a*}, В. В. Ожерельев^{*a*}, *, Р. Б. Калинин^{*a*}

^аВоронежский государственный технический университет, 394026 Россия, Воронеж, Московский пр-т, 14 *e-mail: ozher@mail.ru

> Поступила в редакцию 10.01.2018 г. После доработки 12.04.2018 г.

На основе анализа квадратичных неаффинных смещений атомов изучены процессы зарождения и распространения полосы сдвига в модели металлического стекла железа в условиях одноосного растяжения. Проведен статистико-геометрический анализ эволюции атомной структуры на основе построения многогранников Вороного. Предложена модель зарождения и движения полосы сдвига, основанная на представлениях о формировании поля упругих напряжений, эквивалентного полю дислокации, локализованной в области максимального градиента концентрации локальных центров сдвиговых перестроек.

Ключевые слова: металлическое стекло, моделирование, молекулярная динамика, деформация, пластичность, полоса сдвига, зона сдвиговых преобразований

DOI: 10.1134/S0015323018110116

введение

Характерной особенностью пластического течения металлических стекол (MC) при комнатной температуре является локализация деформации в полосах сдвига [1, 2]. Механизмы зарождения таких полос активно изучаются в последние годы на двойных системах типа металл-металл (Cu–Zr, Ni–Zr и др.), главным образом методами атомистического компьютерного моделирования. Основные достижения таких исследований отражены в обзорных работах [2, 3].

В ряде работ [2–5] показано, что основными носителями пластической деформации МС являются локальные зоны сдвиговых преобразований (STZ). Каждая из таких зон содержит порядка 100 атомов. Их распределение в объеме модельного материала неразрывно связано с неоднородностями структурной организации МС, разной плотностью упаковки атомов. На ряде двойных систем типа металл-металл показано, что за STZ ответственны атомы с большим объемом многогранников Вороного (MB), формирующие рыхлые, плохо упакованные области [2].

Результаты изучения полос сдвига, их эволюции в поле внешних приложенных напряжений путем визуализации STZ указывают на очевидную роль этих зон в деформационных процессах самоорганизации сдвиговых полос [4–6]. Отсутствие физических модельных представлений о процессах самоорганизации локальных пластических сдвигов оставляет нерешенными вопросы, связанные с появлением на деформационной кривой зуба текучести, а также локализацией полос сдвига в тонких (~10 нм) лентообразных областях, пронизывающих всю толщу образца.

Пластическая деформация МС железа изучалась методом молекулярной динамики в работах [7, 8]. Отсутствие полосы сдвига на моделях, содержащих 2000 атомов, очевидно, связано с малыми размерами моделей.

В настоящей работе выполнено моделирование процесса пластической деформации модели МС железа, содержащей 500000 атомов, в условиях одноосного растяжения, изучены особенности эволюции атомной структуры с ростом нагрузки. Предложена псевдодислокационная модель зарождения и распространения полосы сдвига, основанная на самосогласованном характере формирования градиента концентрации локальных сдвигов (STZ).

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделирование проведено в рамках метода молекулярной динамики. Численное интегрирование уравнений движения осуществлялось с временным шагом 1.5 × 10⁻¹⁵ с по алгоритму Верле в скоростной форме. Взаимодействие между атомами железа рассчитывалось с использованием парного потенциала Пака–Доямы [9].

Модель МС железа была получена путем закалки из расплава. Для получения модели исход-



Рис. 1. Изображение модели исходного расплава железа при температуре 2300 К.

ного расплава 500000 атомов случайным образом размещались в расчетной ячейке с размерами $L_x =$ = 158.04 Å, $L_y =$ 158.04 Å, $L_z =$ 316.08 Å по осям x, *v* и *z* соответственно. с периодическими граничными условиями в направлении оси z (рис.1). Скорости атомов были заданы согласно распределению Максвелла для температуры 2300 К. Процедура закалки от 2300 К до 0 К заключалась в ступенчатом понижении температуры на 20 К и последующей выдержке системы в течение 1000 временных шагов с поддержанием постоянной температуры и давления (*NPT*-ансамбль, $P = 10^5$ Па) по методу Берендсена [10]. Затем ограничение по температуре и давлению снималось, и система выдерживалась при постоянной внутренней энергии (NVE-ансамбль) в течение 6000 временных шагов. Скорость закалки составила 2.2×10^{12} K/c.

Деформация модели MC железа со средней скоростью $6.67 \times 10^7 \, {\rm c}^{-1}$ осуществлялась путем одноосного растяжения вдоль оси *z* с шагом 0.01% и выдержкой в течение 1000 временных шагов после каждого шага. В процессе деформации поддерживалась постоянная температура 50 К.

Величина макроскопического напряжения рассчитывалась путем усреднения локальных атомных напряжений [11]. Для изучения эволюции атомной



Рис. 2. Зависимость доли основных MB от температуры в процессе закалки.

структуры МС железа в процессе деформации проводился статистико-геометрический и кластерный анализ с использованием многогранников Вороного.

Для выявления локальных областей, претерпевающих наибольшие пластические преобразования, выполнялся расчет квадратичных неаффин-

ных смещений атомов D_{\min}^2 [5]. Величина D_{\min}^2 рассчитывается, исходя из относительных смещений атомов в локальных областях за вычетом смещений, вызванных упругой деформацией.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В результате закалки от 2300 до 0 К со скоростью 2.2×10^{12} К/с была получена модель железа с аморфной структурой. Проведен статистико-геометрический анализ модели путем построения MB (рис. 2). Наиболее быстрый рост в ходе закалки наблюдается у MB с индексом (0–0–12), соответствующих локальному икосаэдрическому окружению, и близких к ним по форме многогранников (0–1–10–2) и (0–2–8–4), что согласуется с результатами, полученными ранее на меньших по размеру моделях железа (100000 атомов) с периодическими граничными условиями [12, 13].

Модель при температуре 50 К, полученная в результате закалки, была выбрана исходной для деформации. Ее размеры составили $L_x = L_y = 145.2$ Å, $L_z = 290.4$ Å. Путем расчета тензора атомных напряжений на каждом этапе деформации определялось макроскопическое напряжение в направлении оси нагружения.

На рис. 3 представлены зависимости напряжения растяжения и потенциальной энергии, приходящейся на один атом, от величины деформации. Отклонение от линейной зависимости (пунктир-



Рис. 3. Кривая напряжение-деформация при одноосном растяжении модели МС железа.

ная линия на рис. 3) на деформационной кривой, связанное с ростом локальных неупругих перестроек в образце, заметно уже при деформации $\varepsilon \approx 2\%$. Напряжение достигает максимального значения 5.9 ГПа при $\varepsilon \approx 8\%$, после чего на деформационной кривой наблюдается зуб текучести — резкий спад величины напряжения до 4.2 ГПа в интервале деформации 8–10%. В дальнейшем напряжение убывает вплоть до разрушения образца при $\varepsilon \approx 45\%$.

Процессы зарождения и эволюции локальных центров атомных сдвигов контролировались путем расчета квадратичных неаффинных смещений D_{\min}^2 и визуализации этих центров непосредственно на модели. Рисунок 4 иллюстрирует процесс зарождения и последующую эволюцию полос сдвига. Цвет атома отражает величину квадратичных неаффинных смещений D_{\min}^2 (черный цвет соответствует минимальному значению D_{\min}^2 , белый — максимальному).

Как видно из рис. 4, при деформациях менее 8% локальные зоны сдвиговых перестроек располагаются преимущественно раздельно друг от друга, что, по-видимому, связано со спецификой формирования в МС политетраэдрических нанокластеров и рыхлых атомных структур на их границе [12]. По мере увеличения приложенной нагрузки наблюдается рост числа таких локальных зон, при этом уменьшается угол наклона деформационной кривой.

Спад напряжения в интервале деформаций от 8 до 10%, как показывает визуальный анализ модели, происходит одновременно с ростом числа и размеров локальных центров сдвиговых перестроек, их слиянием вблизи поверхности модели с образованием малой по размеру полосы сдвига и лавинным процессом ее дальнейшего роста до столкновения с противоположной поверхностью модели.

Процесс дальнейшего монотонного разупрочнения модели при $\varepsilon > 45\%$ сопровождается зарождением новых сдвиговых локальных центров как в пределах полосы сдвига, так и в непосредственной близости от нее. При этом толщина сдвиговой прослойки растет.

Для выявления закономерностей локальных перестроек атомной структуры с ростом нагрузки после каждого шага деформации определялось количество MB различного типа. На рис. 5 показаны зависимости доли наиболее часто встречающихся многогранников от степени деформации для области образца, в которой распространяется полоса сдвига.



Рис. 4. Изображения модели при деформациях 2.5 (а), 8 (б), 10 (в) и 15 (г)%. Цвет атома обозначает величину квадратичных неаффинных смещений (светлее – больше).

ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ том 120 № 1 2019

0 - 1 - 10 - 20 - 2 - 8 - 4

0-0-12

- 0-3-6-4

0-1-10-3 0-0-12-2

0-1-10-4

- 0-2-8-5 $^{\circ}$

★ 0-3-6-5

-0-0-12-3

Рис. 5. Зависимость доли основных МВ от величины деформации для области распространения полосы слвига

10

ε. %

8

16 18

12 14



Рис. 6. Схематическое изображение перестройки атомной структуры в локальном центре под действием приложенного сдвигового напряжения т (a) и дислокационная петля (б), эквивалентная такой перестройке.

На начальных этапах деформации происходит постепенное снижение доли МВ с индексами (0-1-10-2), (0-0-12), (0-2-8-4), (0-3-6-4), (0-1-10-3), (0-0-12-2) и (0-0-12-3). При этом количество икосаэдров в области полосы сдвига уменьшается значительнее, чем в остальной части образца.

При деформации в пределах 8-9% доля икосаэдров в области полосы уменьшается от 9.6 до 8.6% и в дальнейшем существенно не изменяется до самого разрыва. Это означает, что икосаэдрические многогранники в области распространяющейся полосы сдвига частично разрушаются и переходят в прочие формы МВ.

Проведем анализ процессов самоорганизации локальных центров сдвиговых перестроек, приводящих к появлению макроскопической полосы сдвига. При одноосном нагружении наиболее благоприятные условия для сдвиговых процессов локальной перестройки атомных конфигураций реализуются в плоскостях и направлениях сдвига, ориентированных относительно оси растяжения под углом 45° [14]. Эти направления образуют конус с углом при вершине 90°, а бесконечное число плоскостей действия максимального сдвигового напряжения расположены по касательным к этому конусу. Сдвиговое напряжение и напряжение растяжения соотносятся между собой как 1:2.

В рамках континуального приближения пронесс локальной слвиговой перестройки атомной структуры МС можно интерпретировать как зарождение малой по площади дислокационной петли с эффективной величиной и направлением вектора Бюргерса, которые находятся в прямой зависимости от величины и направления неаффинных смешений атомов данного центра. Плоскости скольжения таких петель ориентированы в соответствии с максимальными величинами слвиговых напряжений при одноосном нагружении, т.е. под углом около 45° к оси растяжения.

Зарождение полосы сдвига можно объяснить следующей качественной моделью. На рис. 6 схематично показан пример перестройки атомной структуры в локальном центре под действием приложенного слвигового напряжения т и эквивалентная такой перестройке сформированная дислокационная петля. В рамках предложенной модели поперечные размеры таких дислокационных петель не превышают несколько межатомных расстояний, а величина вектора Бюргерса составляет доли расстояния между соседними атомами. Поле упругих напряжений, создаваемое такими сверхмалыми по размеру петлями, носит короткодействующий характер: на расстоянии 2-3 диаметра петли напряжение с расстоянием падает пропорционально R^{-3} , в то время как поле напряжений от индивидуальной дислокации уменьшается с расстоянием пропорционально R^{-1} [15]. Упругое поле напряжений таких петель оказывает слабое влияние на образование новых локальных центров перестройки атомной структуры. В отсутствие такого влияния и ввиду случайного распределения направлений векторов Бюргерса дислокационных петель и их плоскостей скольжения (в пределах конуса направлений) однородная деформация приобретает характер одноосного растяжения в направлении приложенной нагрузки и сжатия в направлениях, перпендикулярных оси растяжения [16]. Полосы сдвига в этих условиях не реализуются.

Появление полосы сдвига происходит на этапе быстрого роста числа локальных пластических



8

6

4

2

0

2 Δ 6

104

сдвигов, особенно в непосредственной близости от поверхности модели, их объединения с последующим образованием в объеме тонкой пластически деформированной сдвиговой прослойки. Упрощенная модель такой прослойки с равномерно распределенными дислокациями на фронте ее распространения показана на рис. 7. Величину пластической дисторсии прослойки можно оценить как

$$S_{ik} = \sum_{m}^{p} \omega_i^{(m)} \beta_k^{(m)}, \qquad (1)$$

где $\beta_k^{(m)}$ – вектор Бюргерса локальной дислокационной петли; $\omega_i^{(m)}$ — вектор нормали к плоскости скольжения петли, равный по величине площади петли; *р* – плотность локальных дислокационных петель в единице объема. В соответствии с (1), макроскопическая деформация прослойки плоская, следовательно, одна из главных деформаций равна нулю. Такая деформация отвечает перестройке атомной структуры с инвариантной плоскостью [17], т.е. любой вектор r; в исходной аморфной среде, который совпадает с инвариантной плоскостью, после пересечения границы раздела в объеме прослойки не изменяет направление и величину: $(S_{ik} + \delta_{ik}) r_i = r_k$, где δ_{ik} – сим-вол Кронекера. Это требование выполняется для любого вектора, лежащего в плоскости границы раздела, если дисторсия S_{ik} представима в виде дуального произведения:

$$S_{ik} = m_i \circ S_k, \tag{2}$$

где m_i — единичный вектор нормали к инвариантной плоскости, т.е. к поверхности сдвиговой прослойки; S_k — вектор сдвига, характеризующий относительное смещение плоскостей MC, параллельных инвариантной плоскости.

Такие же требования возлагаются и на инвариантные границы раздела в кристаллах при термоупругом мартенситном превращении и двойниковании [18]. Принципиальное отличие состоит в разных кинематических схемах перестройки атомной структуры. В кристаллах рост продукта превращения (пластинок мартенсита или двойника) происходит путем кооперативного смещения атомов, консервативного скольжения частичных дислокаций [19], при этом спонтанная дисторсия (2) определяется кристаллогеометрией перестройки решетки. Рост сдвиговой прослойки в аморфной структуре может происходить только неконсервативно путем накопления на ее боковых торцах локальных пластических сдвигов с величиной дисторсии, отвечающей требованию (2). Для такого процесса необходим, помимо приложенной внешней нагрузки, дополнительный стимул, обеспечивающий быстрое расширение полосы сдвига. Та-



Рис. 7. Схематическое изображение распространяющейся полосы сдвига и непрерывно распределенных дислокаций на фронте ее распространения.

ким стимулом является поле упругих напряжений, сформированное дисторсией сдвиговой прослойки. Оно эквивалентно полю непрерывно распределенных дислокаций, расположенных на торцевой поверхности прослойки, как это показано на рис. 7. Если толщина прослойки h, то вектор смещения верхней ее поверхности относительно нижней, совпадающий по величине и направлению с вектором Бюргерса дислокации, равен B = hS.

Еще одна принципиальная особенность дисторсии в полосе сдвига, в отличие от спонтанной дисторсии в кристаллах, состоит в том, что ее величина неоднородна в направлении нормали и однородна в плоскости, перпендикулярной этой нормали. Эта неоднородность на рис. 4 проявляется в разной величине неаффинных смещений в направлении нормали к полосе сдвига, и, как следствие, в разной плотности распределения дислокаций на фронте полосы.

Поле напряжений этих дислокаций, совместно с полем напряжений приложенной внешней нагрузки, обеспечивают образование локальных центров перестройки на фронте полосы сдвига с плотностью, соответствующей условию (2), и ее дальнейшее продвижение. Для образования критического зародыша полосы сдвига, очевидно, требуется большее внешнее напряжение, чем для дальнейшего распространения сформированной полосы с дополнительным полем напряжений псевдодислокации на ее фронте. С этим связан резкий спад уровня напряжений на зубе текучести, который заканчивается после достижения полосой сдвига противоположной грани образца.

Дальнейшая деформация ($\varepsilon > 10\%$) происходит за счет формирования локальных сдвиговых центров в пределах сформированной полосы и в областях, непосредственно примыкающих к ней. Необходимость выполнения условия (2) инвариантности дисторсии для вновь сформированных локальных центров приводит к незначительным скачкам напряжения на деформационной кривой. Снижение среднего уровня напряжения с увеличением деформации связано с уменьшением поперечных размеров образца в результате растяжения.

выводы

 Одноосное растяжение молекулярно-динамической модели металлического стекла железа сопровождается образованием полосы сдвига и одновременным появлением на деформационной кривой зуба текучести.

2. Методом статистико-геометрического анализа показано, что уменьшение числа плотноупакованных икосаэдрических и близких к ним по топологии координационных многогранников происходит в процессе зарождения локальных сдвиговых перестроек атомов с большими индексами многогранников Вороного.

3. Предложена модель зарождения и распространения полосы сдвига, основанная на представлениях о формировании за счет объединения локальных пластических сдвигов сдвиговой прослойки, отвечающей требованиям наличия двух инвариантных плоскостей. На фронте распространения сдвиговой прослойки формируется поле напряжений, эквивалентное упругому полю непрерывно распределенных дислокаций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

 Алехин В.П., Хоник В.А. Структура и физические закономерности деформации аморфных сплавов. М.: Металлургия, 1992. 248 с.

- Takeuchi S., Edagawa K. Atomistic simulation and modeling of localized shear deformation in metallic glass // Progress Mater. Sci. 2011. V. 56. №. 6. P. 785–816.
- Greer A.L., Cheng Y.Q., Ma E. Shear bands in metallic glasses // Mater. Sci. Eng. R: Reports. 2013. V. 74. № 2. P. 71–132.
- 4. Argon A.S. Plastic deformation in metallic glasses // Acta Metal. 1979. V. 27. № 1. P. 47–58.
- Falk M.L., Langer J.S. Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids // Phys. Rev. E. 1998. V. 57. № 6. P. 7192–7205.
- 6. Shimizu F., Ogata S., Li J. Theory of shear banding in metallic glasses and molecular dynamics calculations // Mater. Trans. 2007. V. 48. № 11. P. 2923–2927.
- Srolovitz D., Vitek V., Egami T. An atomistic study of deformation of amorphous metals // Acta Metal. 1983. V. 31. № 2. P. 335–352.
- Yamamoto R., Matsuoka H., Doyama M. A three-dimensional computer simulation for the tensile deformation of amorphous iron // Phys. Stat. Sol. (a). 1979. V. 51. № 1. P. 163–172.
- 9. *Torrens I.M.* Interatomic potentials. New York: Academic Press, 1972. 247 p.
- Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. Molecular dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. № 8. P. 3684–3690.
- *Egami T.* Atomic level stresses // Progress Mater. Sci. 2011. V. 56. № 6. P. 637–653.
- 12. Евтеев А.В., Косилов А.Т., Левченко Е.В. Структурная модель стеклования чистых металлов // Письма в ЖЭТФ. 2002. Т. 76. № 2. С. 115–117.
- 13. Евтеев А.В., Косилов А.Т., Левченко Е.В. Атомные механизмы стеклования чистого железа // ЖЭТФ. 2004. Т. 126. № 3. С. 600–608.
- 14. *Павлов П.В., Хохлов А.В.* Физика твердого тела. М.: Высшая школа, 2000. 494 с.
- Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
- 16. Най Дж. Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц. М.: Мир, 1967. 385 с.
- Косилов А.Т., Перевозников А.М., Рощупкин А.М. Динамическая теория когерентных межфазных границ в кристаллах // Поверхность. Физика, химия, механика. 1983. № 10. С. 36–45.
- Батаронов И.Л., Косилов А.Т., Рощупкин А.М. Кристаллогеометрия бездиффузионного фазового превращения // Кристаллография. 1987. Т. 32. № 5. С. 1082–1088.
- 19. *Косевич А.М.* Дислокации в теории упругости. Киев: Наукова думка, 1978. 220 с.