

01,07

## Теоретическая прочность на сдвиг ОЦК- и ГПУ-металлов

© К.А. Букреева<sup>1</sup>, А.М. Искандаров<sup>1,2</sup>, С.В. Дмитриев<sup>1,3</sup>, У. Умено<sup>2</sup>, Р.Р. Мулюков<sup>1</sup><sup>1</sup> Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,  
Уфа, Россия<sup>2</sup> Institute of Industrial Science, University of Tokyo,  
Токио, Япония<sup>3</sup> Национальный исследовательский Томский государственный университет,  
Томск, Россия

E-mail: karina-buk@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 30 июля 2013 г.)

Рассчитаны теоретическая прочность на сдвиг ( $\tau_c$ ) и ее зависимость от температуры для ряда ОЦК- и ГПУ-металлов. Несмотря на обнаруженные различия зависимостей величин  $\tau_c$ , критической деформации ( $\gamma_c$ ) и модуля сдвига ( $G$ ) от температуры, для всех изученных материалов установлен факт слабой температурной зависимости соотношения  $G\gamma_c/\tau_c$ , связывающего эти величины. В рассмотренных интервалах температур отклонение  $G\gamma_c/\tau_c$  от среднего значения составляет не более 12%.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 12-02-315-19 мол\_а и 11-0897057 по-волжье\_а).

### 1. Введение

Теоретическая прочность (ТП) — это максимальная прочность, которую могут демонстрировать бездефектные кристаллы при нулевой температуре. Классическая оценка ТП на сдвиг в модели Френкеля связывает критическое сдвиговое напряжение  $\tau_c$  и модуль сдвига  $G$  следующим образом:  $G/\tau_c = 2\pi$  [1]. ТП по определению является характеристикой бездефектного кристалла, поэтому экспериментальное изучение теоретической прочности стало возможным лишь с появлением методик, позволяющих испытывать на прочность малые объемы материала, в которых дефекты отсутствуют или их концентрация ничтожно мала. В таких условиях, по сути, осуществляется испытание на прочность отдельных межатомных связей, в результате чего происходит либо их разрыв (образование трещин), либо рекомбинация (образование сдвига). К таким экспериментальным методикам можно отнести, например, наноиндентирование, сжатие наностолбиков и т. д. [2–5]. Экспериментальные доказательства возможности достижения ТП послужили поводом для проведения многих теоретических исследований ТП, в том числе и методами атомистического компьютерного моделирования.

В работе [6] с помощью расчетов из первых принципов (*ab initio*) была проведена оценка теоретической прочности  $\tau_c$  для многих металлов и сплавов при сдвиге в разных системах скольжения при нулевой температуре. Полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными, но они в несколько раз ниже, чем теоретическая прочность, оцененная с помощью модели Френкеля, основанной на множестве допущений. Поэтому в работе [6] было предложено следующее обобщение модели Френкеля:  $G\gamma_c/\tau_c = \pi/2$ , включающее не только  $G$  и  $\tau_c$ , но и критическую деформацию  $\gamma_c$ .

Следует отметить, что предложенная в работе [6] модель оценки ТП не учитывает влияния на нее таких

внешних факторов, как гидростатическое давление [7,8] и температура [9–13]. Однако все три параметра, входящие в модель, являются функциями упомянутых внешних факторов.

Приложение гидростатического давления, как правило, приводит к повышению ТП на сдвиг. С другой стороны, при возрастании температуры прочность материалов снижается в результате термоактивации процессов разрыва и/или рекомбинации межатомных связей, что делает весьма важным изучение влияния температуры на ТП кристаллов.

В работах [9–13] была продемонстрирована применимость метода молекулярной динамики (МД) для определения влияния температуры на ТП, и на его основе был установлен факт линейного снижения теоретической прочности на сдвиг с ростом температуры у ГЦК-металлов (Al и Cu) и упорядоченных сплавов ( $\gamma$ -Ni<sub>3</sub>Al и  $\beta$ -NiAl). В то же время величина  $\gamma_c$  с ростом температуры для упомянутых сплавов практически не изменялась, а у Al и Cu снижалась линейно. Насколько нам известно, подобных исследований для ОЦК- и ГПУ-металлов не проводилось. Целью настоящей работы является получение данных о влиянии температуры на ТП на сдвиг для ОЦК- (W,  $\alpha$ -Fe, Mo) и ГПУ-металлов (Mg, Ti). Также было изучено поведение температурных зависимостей отношений  $G/\tau_c$  из модели Френкеля и  $G\gamma_c/\tau_c$  из обобщенной модели Френкеля с целью сравнения полученных результатов с имеющимися данными для других материалов.

### 2. Описание модели

С учетом данного выше определения теоретической прочности в настоящей работе при расчете ТП на сдвиг при конечных температурах рассматривались бездефектные кристаллы. Сдвиг осуществлялся в системах

**Таблица 1.** Теоретическая прочность  $\tau_c$ , критическая степень деформации  $\gamma_c$  и модуль сдвига  $G$  ОЦК-металлов (W,  $\alpha$ -Fe, Mo) и ГПУ-металлов (Mg, Ti) при 0 К

Металл	Система скольжения	$G$ , GPa		$\tau_c$ , GPa		$\gamma_c$	
		<i>Ab initio</i> [6]	МД	<i>Ab initio</i>	МД	<i>Ab initio</i>	МД
W	$[\bar{1}11](211)$	164.0	159.2	26.3 [14]	29.6	0.327 [14]	0.244
	$[1\bar{1}\bar{1}](211)$	164.0	158.4	17.3 [6]	14.4	0.176 [6]	0.126
$\alpha$ -Fe	$[\bar{1}11](211)$	64.8	58.3	15.0 [15]	15.5	–	0.297
	$[1\bar{1}\bar{1}](211)$	64.8	58.5	7.5 [6]	6.6	0.184 [6]	0.166
Mo	$[\bar{1}11](211)$	138.7	132.3	–	26.6	–	0.267
	$[1\bar{1}\bar{1}](211)$	138.7	132.9	14.8 [6]	13.1	0.175 [6]	0.137
Mg	$\{0001\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$	19.2	17.1	1.8 [6]	2.0	0.152 [6]	0.147
Ti	$\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$	47.6	43.1	2.8 [6]	2.6	0.099 [6]	0.093

скольжения, характерных для кристаллической решетки каждого материала. В ОЦК-металлах существуют три основные системы скольжения:  $\{110\}\langle \bar{1}11 \rangle$ ,  $\{211\}\langle \bar{1}11 \rangle$ ,  $\{321\}\langle \bar{1}11 \rangle$ . Однако в работе [6] было показано, что для W,  $\alpha$ -Fe и Mo при 0 К значения ТП на сдвиг для этих систем скольжения практически не различаются. Поэтому в настоящей работе для ОЦК-металлов выбрана только одна система скольжения —  $\{211\}\langle \bar{1}11 \rangle$ , но сдвиг производился в двух направлениях:  $[\bar{1}11]$  и  $[1\bar{1}\bar{1}]$ , так как прочность, достигаемая при сдвиге в этих направлениях, может значительно различаться [14,15]. Например, для W в первом случае она составляет 26 GPa, а во втором — 18 GPa (далее „затрудненная“ и „облегченная“ системы скольжения). В ГПУ-металлах первичная система скольжения определяется соотношением параметров решетки  $c/a$ . Для Mg это соотношение близко к значению 1.633 идеальной ГПУ-решетки, и первичной является базисная система скольжения  $\{0001\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ . Для Ti соотношение  $c/a$  на 2–3% меньше идеального, поэтому для Ti характерна призматическая система скольжения  $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$  [16].

В процессе моделирования сдвиговое напряжение  $\tau_{zx}$  увеличивалось со скоростью 100 МПа/ps начиная с нулевого значения, при этом другие компоненты тензора напряжений были равны нулю (компоненты тензора деформации могли соответствующим образом изменяться). Временной шаг интегрирования уравнений движения атомов по методу Верле четвертого порядка точности составлял 1 fs. Во всех трех направлениях задавались периодические граничные условия. Для ОЦК-металлов теоретическая прочность на сдвиг рассчитывалась в интервале температур от 0 до 1700 К (для железа — от 0 до 900 К, что связано с  $\alpha \rightarrow \gamma$ -превращением при более высоких температурах), для Mg — от 0 до 700 К, а для Ti — от 0 до 1200 К. Для устранения влияния начальных условий и достижения в системе теплового равновесия в начале каждого моделирования структуры выдерживались при заданной температуре исследования в течение 10 ps. ТП на сдвиг  $\tau_c$  и критическая степень сдвиговой деформации  $\gamma_c$

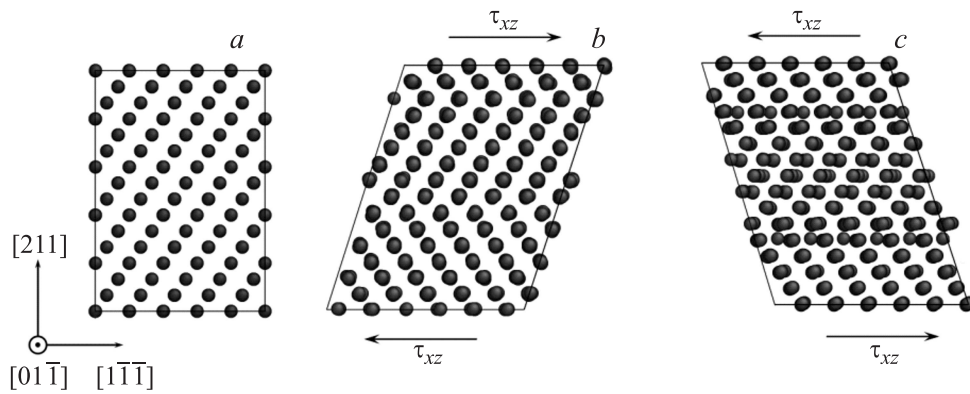
определялись по максимальному значению зависимости  $\tau_{zx}$  от деформации сдвига, что соответствует моменту потери устойчивости кристаллической решетки. Для каждого исследованного значения температуры было проведено по десять экспериментов, по которым проводилось усреднение критических параметров.

Для описания межатомного взаимодействия использовались многочастичные потенциалы, рассчитанные методом погруженного атома. Для каждого материала на основе методики, описанной в работах [11,12], из доступных многочастичных потенциалов выбирался наиболее подходящий для задач настоящего исследования. Для W,  $\alpha$ -Fe и Mo были выбраны многочастичные потенциалы, рассчитанные в [17] и [18], а для Mg и Ti — полученные в [19] и [20] соответственно.

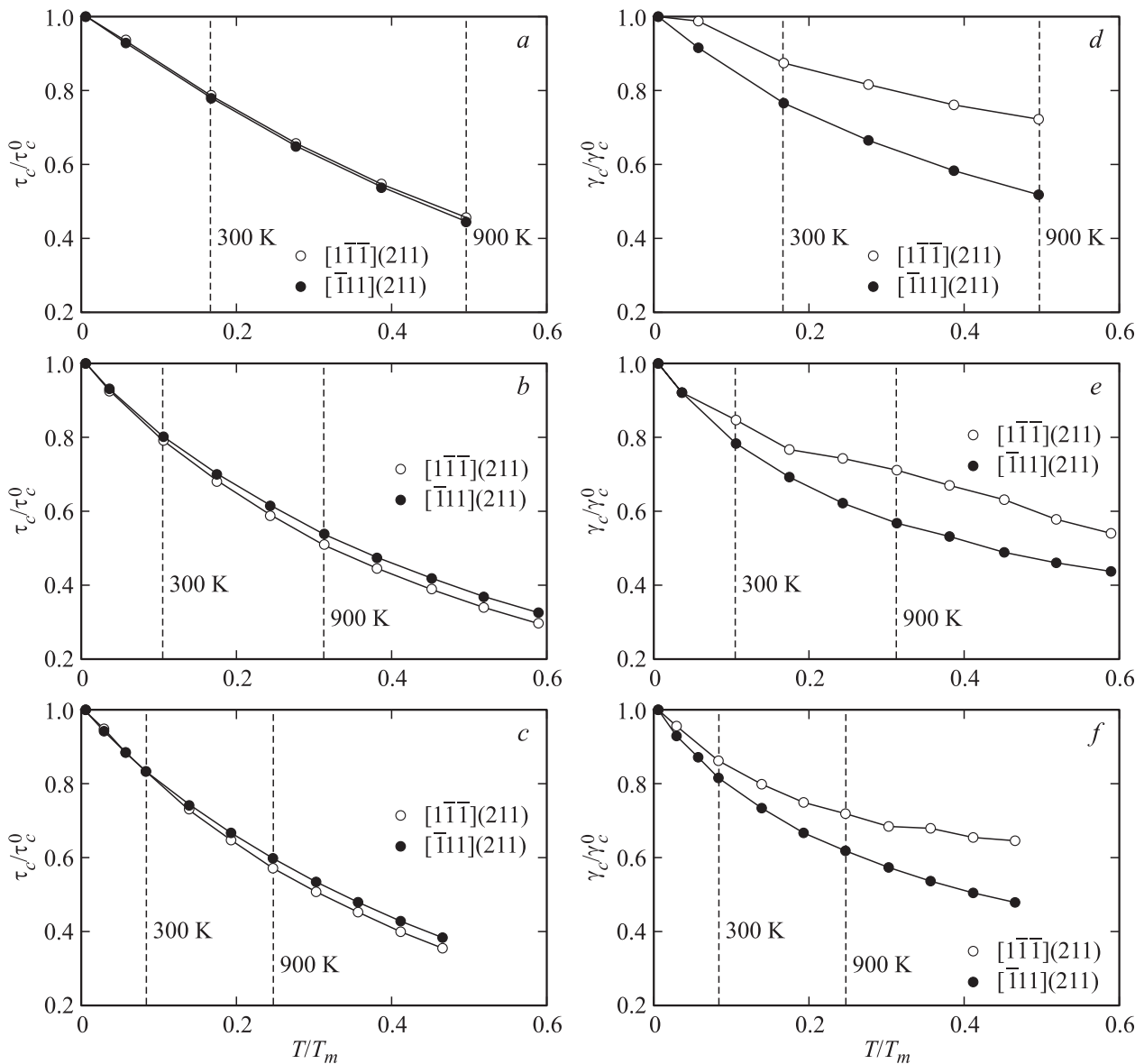
В табл. 1 приведены значения  $\tau_c$ ,  $\gamma_c$  и модуля сдвига  $G$  для ОЦК- и ГПУ-металлов при 0 К, полученные с помощью выбранных эмпирических потенциалов. Для сравнения приведены литературные данные *ab initio* расчетов для каждого материала. Данные, полученные методом МД, близки к результатам *ab initio* расчетов. Для всех металлов различие в значениях  $G$  и  $\tau_c$  не превышает 12 и 20% соответственно. Для всех металлов МД-результаты дают заниженную оценку величины критической деформации  $\gamma_c$ . Наибольшее отклонение величины  $\gamma_c$  от результатов *ab initio* расчетов наблюдается для W и Mo, в то время как для ГПУ-металлов различие лежит в пределах 6%.

### 3. Результаты моделирования

3.1. Механизмы потери устойчивости кристаллических решеток. Рассмотрим сначала механизм потери устойчивости кристаллических решеток в результате сдвиговой деформации, наблюдавшийся для ОЦК-металлов. На рис. 1 на примере  $\alpha$ -Fe представлены проекции расчетной ячейки до приложения сдвига (*a*), после достижения  $\tau_c$  в „облегченной“ системе скольжения (*b*) и после достижения  $\tau_c$  в „затрудненной“ системе скольжения (*c*). Сдвиг в обоих направлениях приводит к



**Рис. 1.** Расчетная ячейка, использованная для моделирования ОЦК-металлов. *a* — исходная структура; *b, c* — структура после достижения  $\tau_c$  вдоль „облегченной“ и „затрудненной“ систем скольжения соответственно.



**Рис. 2.** Температурная зависимость теоретической прочности  $\tau_c$  (*a-c*) и сдвиговой деформации  $\gamma_c$  (*d-f*) для  $\alpha$ -Fe (*a-c*), Mo (*b, e*) и W (*c, f*). Темные символы — „затрудненная“, светлые — „облегченная“ система скольжения,  $\tau_c^0$  — теоретическая прочность на сдвиг при 0 К,  $\gamma_c^0$  — критическая сдвиговая деформация при 0 К,  $T_m$  — температура плавления.

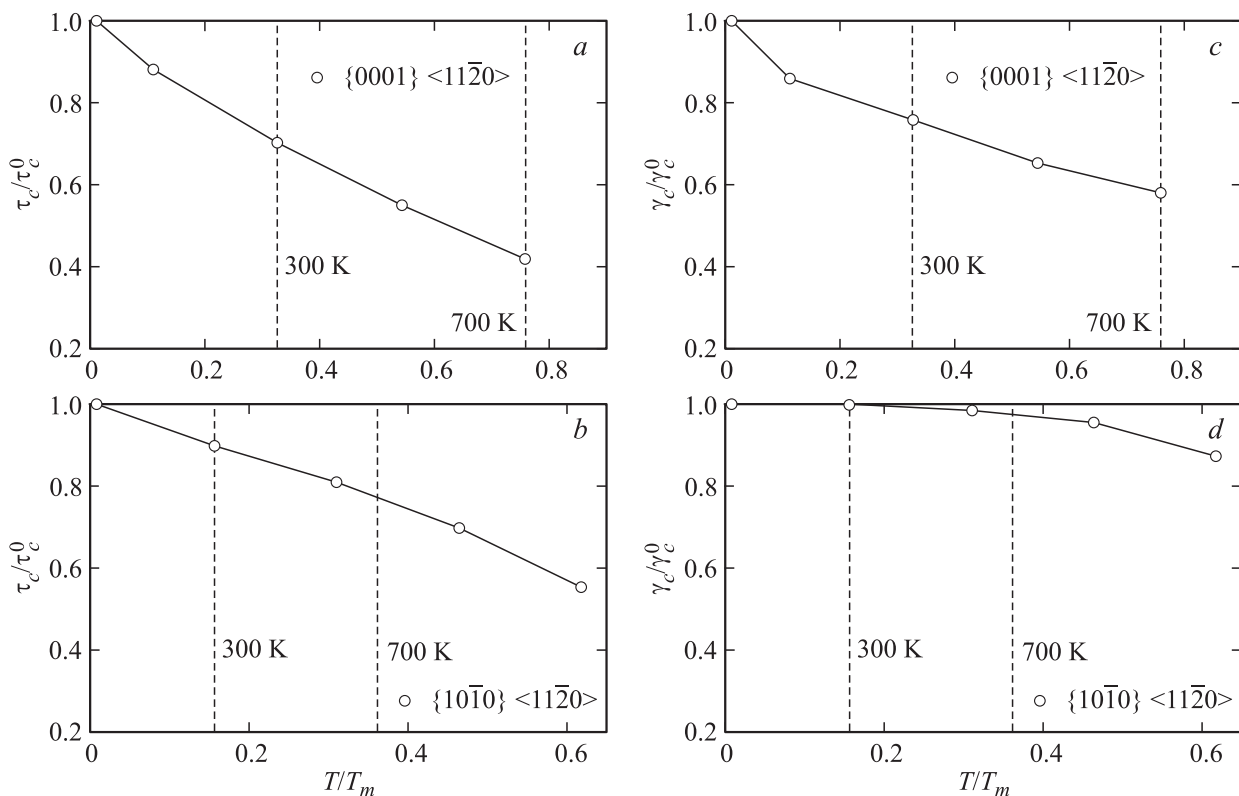


Рис. 3. Температурная зависимость теоретической прочности  $\tau_c$  (a, b) и сдвиговой деформации  $\gamma_c$  (c, d) для Mg (a, c) и Ti (b, d).

формированию двойниковой структуры. Незначительное отличие заметно для сдвига в „затрудненной“ системе скольжения, когда происходит образование неидеальной двойниковой структуры. Это обстоятельство можно объяснить тем, что  $\tau_c$  для этой системы в 2–3 раза выше, чем для „облегченной“ [14,15], так что после потери устойчивости кристаллической решетки структура существенно неравновесна и под действием более высоких напряжений сдвига не успевает перестроиться в соответствующую идеальную двойниковую структуру. Отметим, что процесс двойникования в ходе деформации всех исследуемых ОЦК-металлов известен [21–23], а сам механизм двойникования описан в работе [24].

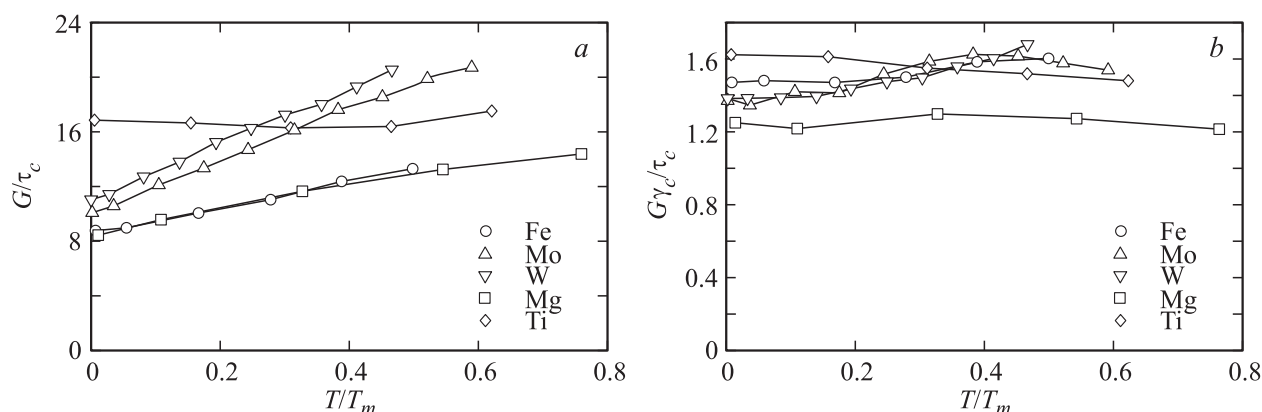
Для обоих ГПУ-металлов в отличие от ОЦК-металлов при достижении критического значения сдвигового напряжения происходило зарождение сдвига между двумя смежными атомными плоскостями, параллельными плоскости сдвига. Аналогичное поведение наблюдалось в наших предыдущих работах для ГЦК-металлов [10–12], интерметаллидных сплавов [13] и кремния [25].

3.2. Температурная зависимость теоретической прочности на сдвиг. Для ОЦК-металлов на рис. 2 представлены температурные зависимости теоретической прочности  $\tau_c(T)$  и критической сдвиговой деформации  $\gamma_c(T)$  в двух исследуемых системах скольжения („затрудненной“ и „облегченной“). Для наглядности значения  $\tau_c$  и  $\gamma_c$  были нормированы на соответствующие значения  $\tau_c^0$  и  $\gamma_c^0$  при 0 К, а температура нормирована на температуру плавления  $T_m = 1812$ ,

2890, 3653, 923 и 1941 К для  $\alpha$ -Fe, Mo, W, Mg и Ti соответственно. Из представленных зависимостей видно, что с ростом температуры  $\tau_c$  и  $\gamma_c$  снижаются для всех исследуемых металлов. Заметим, что в работах [11,12] было обнаружено близкое к линейному снижению теоретической прочности ГЦК-металлов. Однако для ОЦК-металлов подобной зависимости не наблюдается, что предположительно связано с различными механизмами потери устойчивости. В ГЦК-металлах сдвиг происходит с образованием дефекта упаковки, а в ОЦК-металлах, как отмечено выше, наблюдается процесс двойникования структуры.

Отметим, что скорость снижения теоретической прочности с ростом температуры  $\tau_c$  для „затрудненной“ и „облегченной“ систем скольжения практически не различается. При комнатной температуре она на 22, 20 и 17% ниже, чем при 0 К, для  $\alpha$ -Fe, Mo и W соответственно. Критическая деформация  $\gamma_c$  в свою очередь демонстрирует заметно большую скорость убывания для „затрудненной“ системы скольжения (рис. 2, d-f). Так, например, для  $\alpha$ -Fe при комнатной температуре она на 12.5 и 23% ниже, чем при 0 К, для „облегченной“ и „затрудненной“ систем скольжения соответственно. Снижение  $\gamma_c$  для „облегченной“ системы скольжения при 300 К по сравнению с 0 К составляет 12.5, 15 и 13.5%, а при 900 К — 27.5, 29 и 28% для  $\alpha$ -Fe, Mo и W соответственно.

На рис. 3 представлены результаты, аналогичные приведенным на рис. 2, для ГПУ-металлов: Mg и Ti.



**Рис. 4.** Температурная зависимость отношений  $G/\tau_c$  (a) и  $G\gamma_c/\tau_c$  (b), фигурирующих в модели Френкеля и в обобщенной модели Френкеля [6] соответственно. Для ОЦК-металлов данные приведены для „затрудненной“ системы скольжения.

Для обоих металлов  $\tau_c$  и  $\gamma_c$  меняются нелинейно. Однако для Ti наблюдается очень слабое изменение  $\gamma_c$  с возрастанием температуры, в то время как у Mg при 300 К значение  $\gamma_c$  на 24% ниже, чем при 0 К. Аналогичное снижение  $\tau_c$  составляет 30 и 10% для Mg и Ti соответственно.

3.3. Температурная зависимость соотношений  $G/\tau_c$  и  $G\gamma_c/\tau_c$ . На рис. 4, a представлена зависимость отношения  $G/\tau_c$  из модели Френкеля от температуры для всех исследуемых материалов. Несмотря на то что эта модель опирается на множество упрощающих допущений, она дает достаточно хорошую оценку порядка величины  $G/\tau_c$  при  $T = 0$  К. С возрастанием температуры наблюдается заметный рост отношения  $G/\tau_c$  для  $\alpha$ -Fe, Mo и W. Так, при температуре 900 К его значение соответственно на 50,5, 56 и 42% больше, чем при 0 К. Таким образом, отношение  $G/\tau_c$  не является постоянной величиной при различных температурах и его значение, полученное при 0 К с помощью *ab initio* расчетов, не может быть применимо для оценки  $\tau_c$  при  $T > 0$  К. Исключение составляет лишь Ti, для которого  $G/\tau_c$  слабо зависит от температуры.

Температурная зависимость отношения  $G\gamma_c/\tau_c$  из обобщенной модели Френкеля [6] представлена на рис. 4, b. При нулевой температуре значение соотношения  $G\gamma_c/\tau_c$  для всех исследуемых материалов хорошо согласуется со значением  $\pi/2$ , предсказываемым данной моделью. Важной особенностью этого критерия являет-

ся то, что он практически не зависит от температуры для всех рассмотренных материалов, хотя все три величины, входящие в данный критерий, заметно зависят от температуры. Отклонение  $G\gamma_c/\tau_c$  во всем температурном диапазоне от среднего значения составляет не более 10–12% для всех исследуемых материалов. Подобная особенность наблюдалась ранее в работах [10–12] для ГЦК-металлов и кремния. Наглядно различие в поведении параметров  $G\gamma_c/\tau_c$  и  $G/\tau_c$  с ростом температуры показано в табл. 2, где представлено сравнение отношений максимального и минимального значений каждого из них в рассмотренных интервалах температур. Так, изменение первого параметра лежит в пределах 21%, тогда как второй изменяется в 1,5–2 раза, за исключением Ti. Различие в поведении этих параметров определяется зависимостью критической деформации  $\gamma_c$  от температуры. Действительно, чем сильнее меняется  $\gamma_c$ , тем большего различия между параметрами следует ожидать. Это видно при сравнении данных табл. 2 для Ti ( $\gamma_c$  уменьшается на 13%) и, например, Mo ( $\gamma_c$  уменьшается на 45%).

Значение параметра  $G\gamma_c/\tau_c$  можно трактовать как степень нелинейности кривой деформация–напряжение при сдвиговой деформации. Таким образом, полученный результат позволяет сделать вывод, что степень нелинейности кривых деформация–напряжение слабо зависит от температуры.

#### 4. Заключение

Методом молекулярно-динамического моделирования исследовано влияние температуры на теоретическую прочность ОЦК-металлов ( $\alpha$ -Fe, Mo, W) и ГПУ-металлов (Mg, Ti).

При сдвиге чистых ОЦК-металлов в направлениях „облегченной“ и „затрудненной“ систем скольжения механизм потери устойчивости материалов связан с образованием двойниковой структуры. Установлено, что теоретическая прочность на сдвиг  $\tau_c$  и сдвиговая деформация  $\gamma_c$  убывают нелинейно с ростом температуры для

**Таблица 2.** Отношение максимальных значений параметров  $G/\tau_c$  и  $G\gamma_c/\tau_c$  к их минимальным значениям в пределах изученных интервалов температур

Материал	$(G/\tau_c)_{\max}/(G/\tau_c)_{\min}$	$(G\gamma_c/\tau_c)_{\max}/(G\gamma_c/\tau_c)_{\min}$
$\alpha$ -Fe	1.50	1.09
Mo	2.05	1.17
W	1.88	1.21
Mg	1.70	1.07
Ti	1.08	1.09

всех исследуемых направлений сдвига. У ГПУ-металлов при достижении критической сдвиговой деформации происходит гомогенное зарождение пары дислокаций противоположного знака, скольжение которых приводит к относительному сдвигу двух смежных атомных плоскостей, параллельных плоскости сдвига. При этом обнаружено, что критическая деформация в случае Ti очень слабо зависит от температуры (в отличие от Mg).

Несмотря на различную количественную и качественную температурную зависимость теоретической прочности и сдвиговой деформации ОЦК- и ГПУ-металлов, установлено, что в целом для рассмотренных металлов отношение  $G\gamma_c/\tau_c$  из обобщенной модели Френкеля [6] намного слабее зависит от температуры, чем отношение  $G/\tau_c$  из модели Френкеля, которое демонстрирует значительный рост при возрастании температуры. Ранее аналогичный вывод был сделан для ГЦК-металлов, интерметаллидных сплавов NiAl и Ni<sub>3</sub>Al, а также для кремния.

Полученная в работе слабая температурная зависимость параметра  $G\gamma_c/\tau_c$  имеет принципиальное значение, поскольку она позволяет использовать обобщенную модель Френкеля для оценки теоретической прочности на сдвиг при конечных температурах с помощью данных *ab initio* расчетов при нулевой температуре.

## Список литературы

- [1] J. Frenkel. *Z. Phys.* **37**, 572 (1926).
- [2] J.R. Greer, W.D. Nix. *Phys. Rev. B* **73**, 245 410 (2006).
- [3] H. Bei, S. Shim, E. George, G.M. Pharr. *Phys. Rev. B* **77**, 060 103 (2007).
- [4] S.-W. Lee, S.M. Han, W.D. Nix. *Acta Mater.* **57**, 4404 (2009).
- [5] A.M. Minor, S.A. Syed Asif, Z. Shan, E.A. Stach, E. Cyranowski, T.J. Wyrobek, O.L. Warren. *Nature Mater.* **5**, 697 (2006).
- [6] S. Ogata, J. Li, N. Hirosaki, Y. Shibutani, S. Yip. *Phys. Rev. B* **70**, 104 104 (2004).
- [7] Y. Umeno, M. Cerny. *Phys. Rev. B* **77**, 100 101 (R) (2008).
- [8] Y. Umeno, Y. Shihara, N. Yoshikawa. *J. Phys.: Cond.: Matter* **23**, 385 401 (2011).
- [9] T. Zhu, J. Li, A. Samanta, A. Leach, K. Gall. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 025 502 (2008).
- [10] А.М. Искандаров, Y. Umeno, С.В. Дмитриев. *Письма о материалах* **1**, 3, 143 (2011).
- [11] А.М. Iskandarov, S.V. Dmitriev, Y. Umeno. *Phys. Rev. B* **84**, 224 118 (2011).
- [12] А.М. Iskandarov, S.V. Dmitriev, Y. Umeno. *J. Solid Mech. Mater. Eng.* **6**, 29 (2012).
- [13] А.М. Искандаров, К.А. Букреева, Y. Umeno, С.В. Дмитриев. *Письма о материалах* **2**, 4, 253 (2012).
- [14] D. Roundy, C.R. Krenn, M.L. Cohen, J.W. Morris, jr. *Phil. Mag. A* **81**, 7, 1725 (2001).
- [15] D.M. Clatterbuck, D.C. Chrzan, J.W. Morris, jr. *Acta Mater.* **51**, 2271 (2003).
- [16] Т.П. Черняева, В.М. Грицина. *Вопр. атом. науки и техники* **2**, 15 (2008).
- [17] X. W. Zhou, H.N.G. Wadley, R.A. Johnson, D.J. Larson, N. Tabaat, A. Serezo, A.K. Petford-Long, G.D.W. Smith, P.H. Clifton, R.L. Martens T.F. Kelly. *Acta Mater.* **49**, 4005 (2001).
- [18] X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley. *Phys. Rev. B* **69**, 144 113 (2004).
- [19] B. Jelinek, S. Groh, M.F. Horstemeyer, J. Houze, S.G. Kim, G.J. Wagner, A. Moitra, M.I. Baskes. *Phys. Rev. B* **85**, 245 102 (2012).
- [20] Y. Mishin. *Acta Mater.* **52**, 1451 (2004).
- [21] E. Lassner, H.-D. Schubert. *Tungsten: properties, chemistry, technology of the element, alloys, and chemical compounds.* Kluwer Academic/Plenum publ., N.Y. (1999). 429 p.
- [22] A.R. Rosenfield, B.L. Averbach, M. Cohen. *Acta Met.* **11**, 1100 (1963).
- [23] S. Ogata, J. Li, S. Yip. *Phys. Rev. B* **71**, 224 102 (2005).
- [24] R.J. Wasilewski. *Met. Transact.* **1**, 2641 (1970).
- [25] А.М. Искандаров, Ё. Умено. *Фундам. пробл. соврем. материаловедения* **9**, 1, 89 (2012).