

УДК 538.91

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МЕДИ

А. В. Болеста, В. М. Фомин

Институт теоретической и прикладной механики  
им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия  
Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия  
E-mails: bolesta@itam.nsc.ru, fomin@itam.nsc.ru

Предложен подход, позволяющий моделировать методом молекулярной динамики образование поликристаллических материалов из расплава при его охлаждении. Получены атомные конфигурации меди, соответствующие поликристаллам со средним размером зерна от 2 до 16 нм. Выполнено молекулярно-динамическое исследование изотермического одноосного растяжения и сжатия полученных поликристаллов. Показано, что при среднем размере зерна в нанокристаллической меди менее 10 нм с его уменьшением модуль Юнга и предел текучести уменьшаются. Построены ударные адиабаты для поликристаллической меди. Показано, что для материала с размером зерна, приблизительно равным 2 нм, температура за фронтом ударной волны на 10 % выше, чем в поликристалле с размером зерна более 10 нм. В расчетах по молекулярно-динамической модели обнаружено присутствие меди с объемно центрированной кубической решеткой за фронтом ударной волны с давлением от 100 до 200 ГПа.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, поликристалл, медь, одноосная деформация, ударная волна, фазовый переход.

**Введение.** Исследование влияния структуры поликристаллических металлов и сплавов на их термомеханические свойства необходимо при создании новых нанокристаллических высокотвердых материалов и определении их упругих модулей, предела текучести и ударной адиабаты. Для широкого класса материалов предел текучести обратно пропорционален квадратному корню из размера зерна. Это соотношение, известное как закон Холла — Петча [1, 2], экспериментально подтверждается при размере зерна  $10^{-7} \div 10^{-3}$  м. В данном случае существенным является вопрос о том, при каких минимальных размерах зерен справедлива эта зависимость. Результаты экспериментов [3, 4] показывают, что при размере зерна порядка 10 нм увеличение твердости прекращается, а в некоторых случаях зависимость может смениться на обратную [5, 6]. Данные результаты подтверждаются в ряде работ, посвященных моделированию механического поведения нанокристаллических металлов на атомном уровне [7, 8]. Использование при решении рассматриваемой проблемы метода молекулярной динамики позволило выявить важный механизм деформации — зернограничное скольжение, который в нанокристаллических материалах конкурирует с дислокационным механизмом и вызывает изменение их свойств, что приводит к нарушению закона Холла — Петча. Несмотря на определенный прогресс в решении данной проблемы, ряд вопросов остается невыясненным. В частности, в работах [7, 8] начальная структура материала формируется методом многогранников Вороного, который является

геометрическим и не учитывает различие значений энергии возникающих в результате его применения границ между зернами с различной ориентацией кристаллической решетки. В свою очередь это может привести к существенному увеличению доли высокоэнергетических границ зерен, что не соответствует действительности, поскольку разнообразные равновесные системы в природе, как правило, формируются в соответствии с распределением Больцмана. Кроме того, данный метод формирования начальной структуры поликристалла исключает наличие начальных дефектов внутри зерен. Также недостаточно исследовано влияние структуры поликристаллов на их поведение в результате ударно-волнового нагружения. Несмотря на то что в ряде работ показано существенное различие характера распространения ударной волны по монокристаллическому и поликристаллическому металлам [9, 10], влияние размера зерна на его ударную адиабату до сих пор не определено.

В настоящей работе предложена методика формирования атомной структуры поликристаллической меди из расплава путем его охлаждения. Полученные начальные данные для поликристаллов с различным размером зерна использовались для дальнейшего моделирования изотермических одноосных растяжения и сжатия. По рассчитанным кривым нагружения образцов определены модуль Юнга и предел текучести. Полученные зависимости модуля Юнга и предела текучести от размера зерна сравнивались с экспериментальными данными и известными результатами расчетов, что позволило выявить преимущества предложенной методики формирования атомной структуры нанокристаллической меди. Для построения ударной адиабаты выполнено молекулярно-динамическое моделирование распространения ударной волны в нанокристаллической меди с различным размером зерна. Давление на фронте ударной волны варьировалось вплоть до значений, при которых начиналось плавление вещества, что позволило сравнить рассчитанные параметры ударной адиабаты с экспериментальными данными и выявить особенности, вызванные изменением среднего размера зерна. Также изучены структура вещества и механизм деформации за фронтом сильной ударной волны в поликристаллической меди.

**Физическая модель и метод моделирования.** Моделирование проводилось методом молекулярной динамики (МД). Взаимодействие атомов меди рассчитывалось в рамках метода внедренного атома [11]. Расчет траекторий движения проводился с помощью пакета LAMMPS [12]. Для формирования начальных данных атомы размещались в расчетной ячейке в порядке, соответствующем гранецентрированной кубической решетке. Затем полученная система нагревалась до температуры выше точки плавления, при этом давление поддерживалось равным атмосферному. Полученный расплав резко охлаждался при атмосферном давлении до температуры от 400 до 1200 К, после чего в процессе эволюции системы при постоянной температуре в ней происходила гомогенная нуклеация кристаллитов меди, которые росли в течение нескольких десятков наносекунд, образуя поликристалл. Для прекращения роста зерен система охлаждалась до комнатной температуры, равной 300 К. Релаксация проводилась с помощью алгоритмов термостата Ноэ — Гувера [13] и баростата [14]. Использование различных режимов нуклеации и роста зерен приводит к формированию поликристаллической структуры с различным средним размером зерна. Для вычисления среднего размера зерна в системе применялась следующая процедура. Вводилось понятие гранецентрированного кубического кластера — множества всех связанных атомов с гранецентрированной кубической локальной координацией. Для выявления состояния системы атомов наряду с классической парной функцией радиального распределения использовался анализ по ближайшим соседям [15, 16], позволяющий выявлять атомы с локальной координацией, соответствующей гранецентрированной кубической (ГЦК), гексагональной плотноупакованной (ГПУ) и объемно центрированной кубической (ОЦК) кристаллическим решеткам и неупорядоченной фазе. Два атома считались

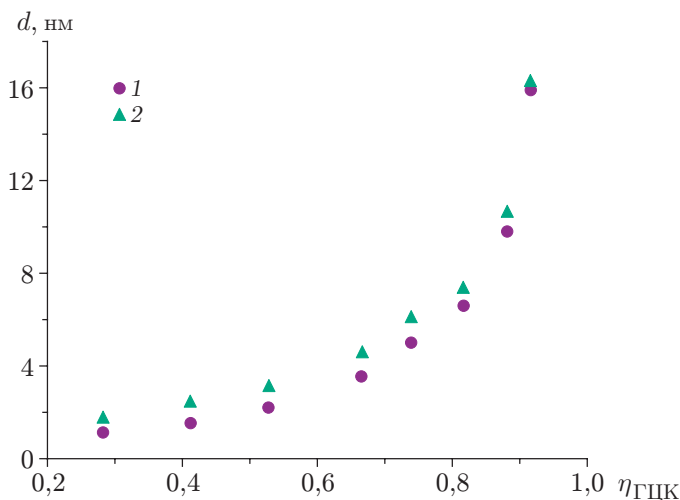


Рис. 1



Рис. 2

Рис. 1. Зависимость среднего диаметра ГЦК-кластера  $d_{\text{ГЦК}}$  (1) и (ГЦК+ГПУ)-кластера  $d_{\text{ГЦК+ГПУ}}$  (2) от доли атомов с ГЦК-координацией в расчетной ячейке  $\eta_{\text{ГЦК}}$

Рис. 2. Поликристалл меди с размером зерна, приблизительно равным 2 нм

связанными, если расстояние между ними в заданный момент времени было меньше расстояния, вычисляемого как первый минимум в парной функции радиального распределения. В результате выявления всех определенных таким образом ГЦК-кластеров вычислено среднее количество атомов  $N_{\text{кл}}^{\text{ГЦК}}$ , принадлежащих им. Далее вычислялся средний диаметр ГЦК-кластеров  $d_{\text{ГЦК}}$  по формуле

$$d_{\text{ГЦК}} = (3N_{\text{кл}}^{\text{ГЦК}}/(2\pi))^{1/3}a, \quad (1)$$

где  $a$  — параметр кристаллической решетки. В выражении (1) использовано предположение о сферической форме кластеров, что в общем случае верно только с некоторой погрешностью. Аналогично рассчитывался диаметр кластера  $d_{\text{ГЦК+ГПУ}}$ , содержащего все связанные ГЦК- и ГПУ-атомы. Оба значения среднего размера кластера монотонно зависят от доли атомов с ГЦК-координацией — величины  $\eta_{\text{ГЦК}}$ , характеризующей степень кристаллизации системы (рис. 1). Средний размер кластеров, содержащих атомы с (ГЦК+ГПУ)-координацией, незначительно больше. Это обусловлено тем, что в ГЦК-кристаллах атомы с ГПУ-координацией принадлежат дефектам упаковки. Представляется естественным в качестве кристаллического зерна принять кластер, содержащий как атомы с ГЦК-координацией, так и атомы дефектов с ГПУ-координацией. Далее под средним размером зерна понимается величина  $d_{\text{ГЦК+ГПУ}}$ . На рис. 2 представлена модель полученного поликристалла со средним размером зерна, приблизительно равным 2 нм (показаны только атомы с локальной координацией, соответствующей ГЦК-решетке).

Поскольку при увеличении температуры в силу роста флуктуаций межатомных расстояний для некоторых атомов, находящихся в упорядоченной фазе, алгоритм анализа по ближайшим соседям [15, 16] может неправильно определять координацию, относя их к неупорядоченной фазе, в данной работе дополнительно проводился расчет структурного фактора:

$$S(k) = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{a=1}^N \sum_{i=1}^3 \exp(ik^i r_a^i) \right|^2 \right\rangle \quad (2)$$

( $N$  — полное число атомов;  $r_a^i$  — вектор положения атома с номером  $a$ ; осреднение проводится по телесному углу волнового вектора  $k^i$ ). Данная структурная характеристика состояния вещества непосредственно определяется в экспериментах с использованием дифракции рентгеновского излучения на порошках или поликристаллах. Нормировка структурного фактора выбрана таким образом, чтобы для идеального газа выполнялось тождество  $S(k) \equiv 1$ . В кристаллическом состоянии зависимость  $S(k)$  представляет собой кривую с четко выраженными максимумами, характеризующую данную фазу. Положение максимумов  $k_{\max}$  соответствует определенным межплоскостным расстояниям  $d = 2\pi/k_{\max}$  в соответствующей кристаллической решетке.

Моделирование изотермического одноосного растяжения-сжатия композиции проводилось путем периодического масштабирования размера расчетной ячейки в заданном направлении с релаксацией системы в промежутках между масштабированием. При этом в данном направлении растяжения или сжатия выполнялись периодические граничные условия. В рассматриваемом случае скорость деформации расчетной ячейки составляла  $10^8 \text{ с}^{-1}$ , что соответствовало относительной скорости границ расчетной ячейки, приближенно равной 2 м/с. Это значение, существенно меньшее скорости звука в меди, соответствовало квазистатической деформации.

Моделирование ударно-волнового нагружения материала проводилось путем введения в систему ударника, движущегося с постоянной заданной скоростью. В такой постановке задачи время наблюдения за состоянием вещества за фронтом ударной волны ограничено временем распространения ударной волны по расчетной ячейке, что составляет несколько десятков пикосекунд. Поэтому для выявления более длительной эволюции структуры вещества за фронтом применялся алгоритм гюгионистата [17].

**Одноосная изотермическая деформация нанокристалла меди.** Для моделирования процесса изотермической одноосной деформации поликристаллической меди формировалась расчетная ячейка размером приблизительно  $18 \times 18 \times 18 \text{ нм}$ , содержащая  $5 \cdot 10^5$  атомов. В случае наибольшего размера зерна размер ячейки в каждом из трех направлений увеличивался в два раза. Расчет одноосного растяжения полученных конфигураций атомов с различным размером зерна проводился при постоянной температуре, равной 300 К, и постоянном напряжении в поперечном направлении, близком к нулю. Вдоль всех трех координатных осей выполнялись периодические граничные условия. В постановке задачи с постоянной величиной поперечных напряжений наклон кривой на упругом участке нагружения (рис. 3) соответствует модулю Юнга среды. Первый максимум на кривой, за которым следует некоторое уменьшение напряжения, интерпретировался как предел текучести. Такое определение предела текучести является неоднозначным. Так, в работах [7, 8] в качестве предела текучести выбиралось значение напряжения, достигаемое в системе при деформации более 6 %. Это значение меньше первого максимального значения. Построение в [7, 8] начальных данных методом многогранников Вороного автоматически исключает наличие дефектов внутри зерен в начальном состоянии, что приводит к значительному уменьшению напряжения после достижения первого максимума на кривой нагружения. Данный спад обусловлен наличием энергетического барьера, который необходимо преодолеть системе для образования первого дефекта в зерне. В рассматриваемом случае формирования поликристалла из расплава при его охлаждении в начальных данных имеется некоторое количество дефектов внутри зерен, поэтому уменьшение напряжения после первого максимума на кривой нагружения является менее существенным. Кроме того, сама постановка задачи с периодическими граничными условиями ограничивает возможность корректного расчета сильных деформаций образца, так как условие периодичности препятствует объединению одиночных дефектов упаковки в структуры — мезополосы деформации, размер которых больше размера расчетной ячейки.

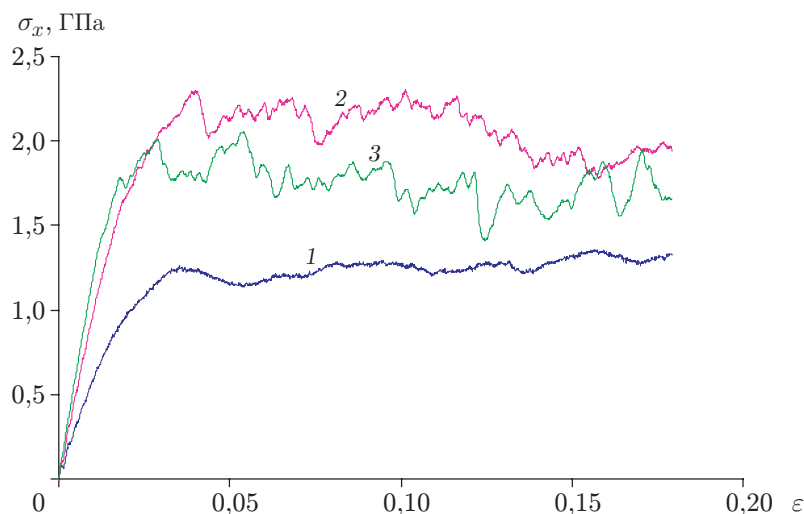


Рис. 3. Зависимость напряжения  $\sigma_x$  от степени деформации  $\varepsilon$  при одноосном изотермическом растяжении поликристаллов с различными размерами зерна: 1 —  $d = 2$  нм, 2 —  $d = 6$  нм, 3 —  $d = 13$  нм

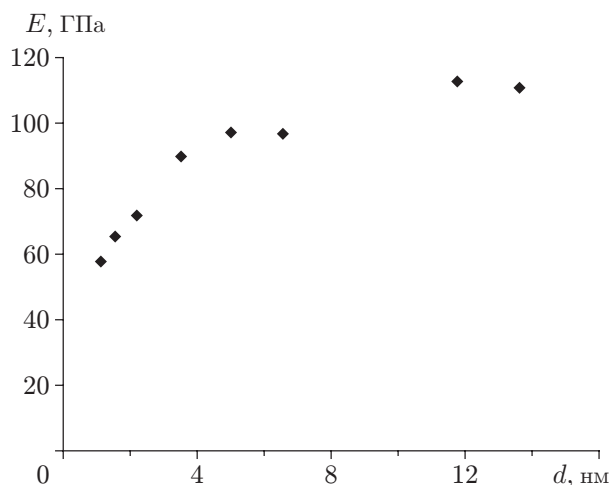


Рис. 4. Зависимость модуля Юнга  $E$  от среднего размера зерна поликристаллической меди  $d$

Из рис. 3 следует, что размер зерна оказывает существенное влияние на характерные параметры кривой нагружения. При наименьшем среднем размере зерна значение модуля Юнга почти в два раза меньше максимального значения (рис. 4), затем оно увеличивается до 110 ГПа. Аналогичное поведение наблюдалось в расчетах методом МД (см. рис. 1 в [7]). Что касается предела текучести, то зависимость его от размера зерна также очень близка к наблюдаемой в [7, 8]. Увеличение предела текучести с уменьшением размера зерна, характерное для соотношения Холла — Петча, продолжается до тех пор, пока не будет достигнут максимум при диаметре зерна около 8 нм, затем предел текучести уменьшается (рис. 5). Такое изменение механических свойств вызвано изменением механизма деформации [7]. С уменьшением размера зерна возрастает влияние механизма зернограницного скольжения (скольжения зерен как целого относительно друг друга) по сравнению с влиянием традиционного дислокационного механизма деформации. Результаты расчета модуля Юнга и предела текучести при одноосном изотермическом сжатии нанокристаллической

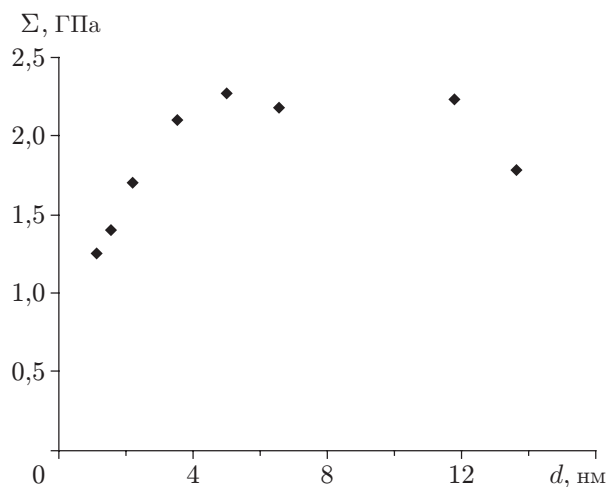


Рис. 5. Зависимость предела текучести  $\Sigma$  от среднего размера зерна поликристаллической меди  $d$

меди близки к соответствующим результатам, полученным в случае растяжения. Таким образом, использование предложенной методики позволяет получить атомные конфигурации поликристаллов меди с различным средним размером зерна, механические свойства которых хорошо согласуются с механическими свойствами монодисперсных поликристаллов, моделируемых методом многогранников Вороного [7, 8].

**Ударная адиабата.** Для моделирования процесса распространения ударной волны по поликристаллической меди формировалась расчетная ячейка размером приблизительно  $55 \times 18 \times 18$  нм, содержащая  $1,5 \cdot 10^6$  атомов. Вдоль осей  $y$  и  $z$  задавались периодические граничные условия, а в направлении вдоль оси  $x$  границы системы были свободными. Возбуждение ударной волны осуществлялось путем введения в систему ударника — стенки, отталкивающей атомы меди вследствие наличия достаточно жесткого потенциала взаимодействия. Фактически решение уравнений движения проводилось в системе отсчета, в которой ударник покоился, а поликристалл меди налетал на него с заданной массовой скоростью. По распределениям плотности (рис. 6), давления  $P_x$ , температуры  $T$  и внутренней

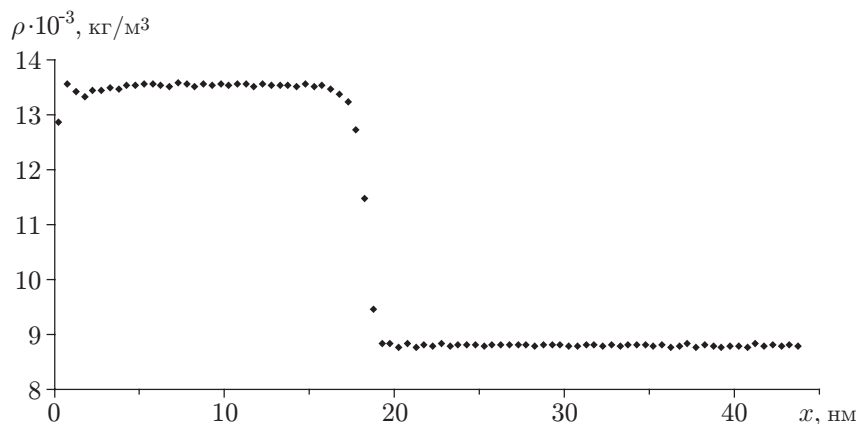


Рис. 6. Распределение плотности  $\rho$  в поликристаллической меди со средним размером зерна 2 нм, по которой распространяется ударная волна с массовой скоростью за фронтом  $u_p = 2,85$  км/с ( $P_x = 200$  ГПа,  $T = 5500$  К,  $u_s = 8,1$  км/с)

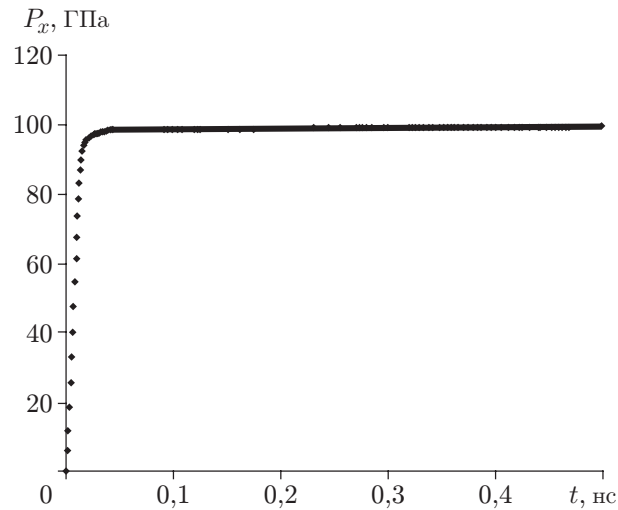


Рис. 7. Зависимость давления  $P_x$  от времени, полученная с использованием алгоритма гюгионистата [17] при заданном конечном давлении  $P_x^k = 100$  ГПа и  $d = 2$  нм

энергии  $\varepsilon$  вдоль оси  $x$  в различные моменты времени можно рассчитать скорость распространения ударной волны, а также проверить справедливость соотношений Гюгионо — законов сохранения массы, импульса и энергии на фронте ударной волны

$$\rho_0 u_s = \rho(u_s - u_p); \quad (3)$$

$$P_{xx} = P_0 + \rho_0 u_s u_p; \quad (4)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{1}{2} (P_x + P_0) \left( \frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right), \quad (5)$$

где  $\rho_0$ ,  $P_0$ ,  $\varepsilon_0$  и  $\rho$ ,  $P_x$ ,  $\varepsilon$  — плотность, давление и внутренняя энергия, приходящиеся на единицу массы, перед фронтом волны и за ним соответственно;  $u_p$  — массовая скорость за фронтом;  $u_s$  — скорость перемещения фронта. Данные законы сохранения следуют из классических уравнений движения, решаемых методом МД, поэтому проверка их выполнения может служить дополнительным тестом проводимых расчетов. Результаты такого расчета приведены на рис. 6.

Переход вещества в состояние, соответствующее ударной адиабате, может быть осуществлен также с использованием алгоритма гюгионистата, предложенного в [17]. В данном случае задается требуемое давление за фронтом  $P_x$ , затем система сжимается до заданного давления в направлении  $x$ , одновременно нагреваясь. При этом она переходит в состояние, удовлетворяющее соотношению (5), за время порядка 50 пс. Затем может быть исследована достаточно длительная эволюция структурного состояния системы за времена порядка сотен наносекунд (рис. 7). Установившиеся в конечном состоянии степень сжатия  $\rho/\rho_0$  и температура  $T$  соответствуют состоянию за фронтом ударной волны. Скорость ударной волны и массовая скорость за ее фронтом могут быть рассчитаны с помощью соотношений (3), (4). На рис. 8, 9 приведены результаты расчетов методом МД ударной адиабаты для поликристаллической меди с различными размерами зерна, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными [18]. Следует отметить, что размер зерна оказывает незначительное (в пределах 2 %) влияние на ударную адиабату. Более сильной является зависимость температуры за фронтом ударной волны от среднего размера зерна (рис. 10). В отличие от степени сжатия температура за фронтом не ограничивается

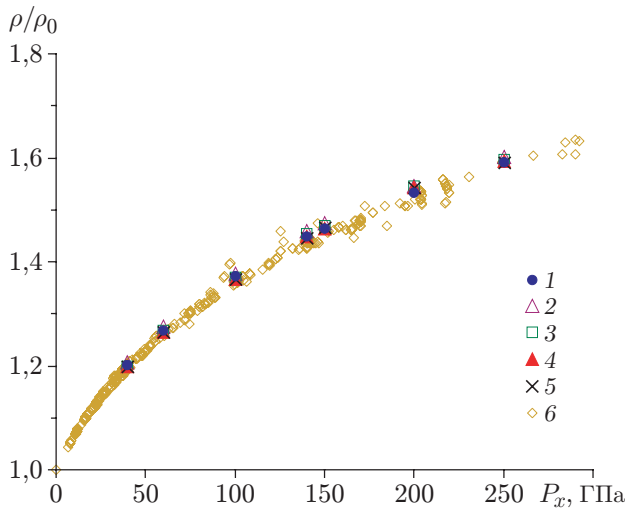


Рис. 8

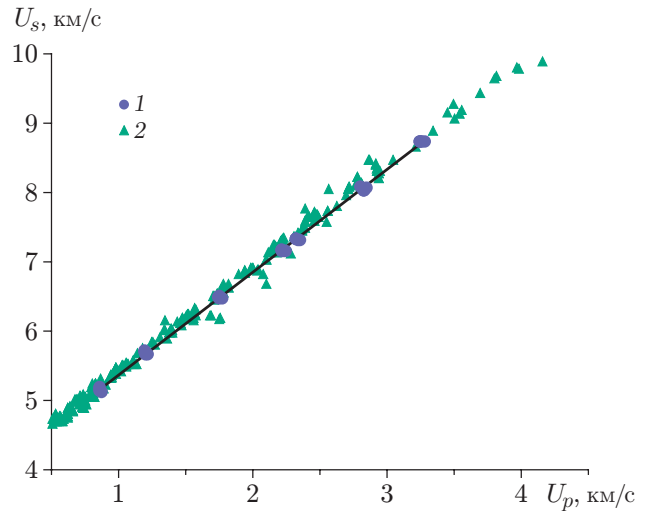


Рис. 9

Рис. 8. Зависимость степени сжатия за фронтом ударной волны  $\rho/\rho_0$  от давления  $P_x$ :

1 — монокристаллическое состояние, 2–5 — поликристаллическое состояние (2 —  $d = 2$  нм, 3 —  $d = 5$  нм, 4 —  $d = 7$  нм, 5 —  $d = 12$  нм), 6 — экспериментальные данные для микрокристаллической меди [18]

Рис. 9. Зависимость скорости ударной волны  $U_s$  от массовой скорости  $U_p$ :

1 — результаты моделирования методом МД, 2 — экспериментальные данные [18]; линия — линейная аппроксимация результатов расчетов методом МД по формуле  $y = 1,48x + 3,89$

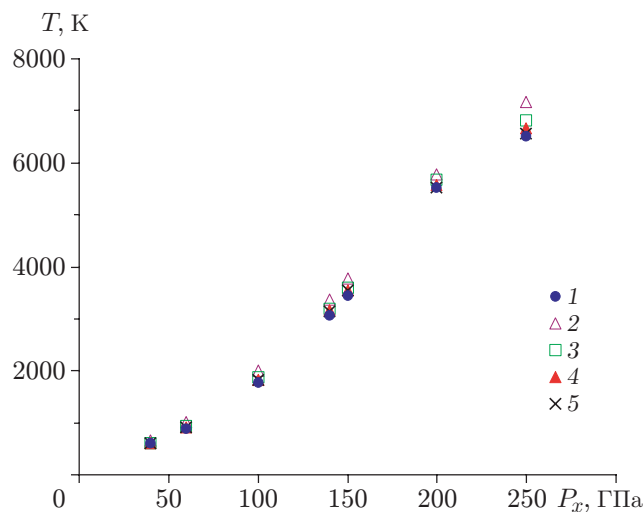


Рис. 10. Зависимость температуры за фронтом ударной волны  $T$  от давления  $P_x$ :

1 — монокристаллическое состояние, 2–5 — поликристаллическое состояние (2 —  $d = 2$  нм, 3 —  $d = 5$  нм, 4 —  $d = 7$  нм, 5 —  $d = 12$  нм)



законами сохранения (3)–(5). Соотношение (5) лишь регулирует приращение внутренней энергии  $\varepsilon - \varepsilon_0$ , а ее перераспределение между кинетической (температура) и потенциальной составляющими зависит от начального состояния вещества. Атомы в поликристаллах с наименьшим размером зерна около 2 нм обладают повышенной по сравнению с монокристаллом и поликристаллом с большим размером зерна ( $d > 6$  нм) начальной средней потенциальной энергией, вследствие чего при ударном нагружении увеличивается степень диссипации энергии, а следовательно, и температура за фронтом (приблизительно на 10 %).

**Структура материала за фронтом ударной волны.** При анализе структуры материала за фронтом волны прежде всего необходимо выяснить, при каком давлении на фронте он расплавится. Полное плавление меди за фронтом определялось с помощью структурного фактора (2) и происходило при  $P_x = 220 \div 230$  ГПа, что согласуется с полученными ранее результатами экспериментов и исследований методом МД [19]. Поликристалл с наименьшим размером зерна 2 нм плавится при давлении 205 ГПа, что согласуется с данными о влиянии размера зерна на температуру, соответствующую ударной адиабате, описанными выше. При значительно меньших давлениях в случае ударно-сжатого материала непосредственно за фронтом волны большая часть атомов также теряет локальную координацию, соответствующую какой-либо кристаллической структуре. В работе [20] это явление названо виртуальным плавлением. В силу негидростатического характера нагружения в объеме за фронтом ударной волны возникают большие касательные напряжения, связанные с девиаторной частью тензора напряжений, которые характеризуются соотношением

$$P_\tau = (P_x - (P_y + P_z)/2)2.$$

На рис. 11 приведена зависимость от времени касательного напряжения, возникающего в результате сжатия поликристалла с наименьшим размером зерна 2 нм, полученная с помощью алгоритма гюгониостата [17] с заданным конечным давлением  $P_x^k = 100$  ГПа. В момент времени  $t = 10$  пс касательное напряжение достигает максимума  $P_\tau = 2,7$  ГПа, а затем резко уменьшается, при этом приблизительно в три раза уменьшается количество атомов, обладающих кристаллической координацией. Локальная координация большей ча-

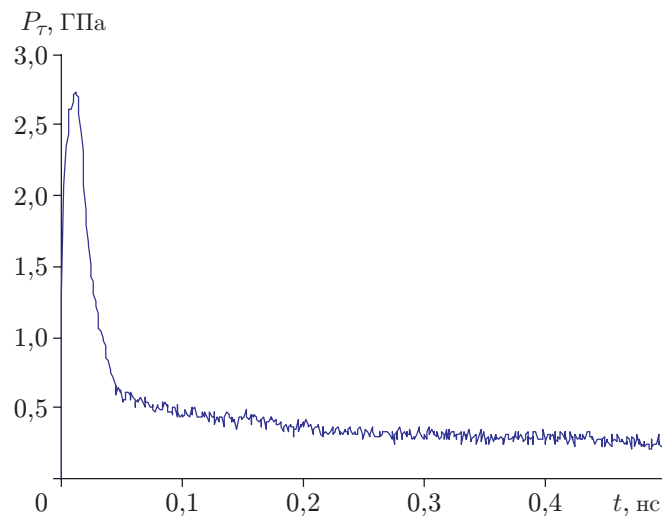


Рис. 11. Зависимость касательного напряжения  $P_\tau$  от времени, полученная в результате расчета эволюции системы с помощью алгоритма гюгониостата [17] ( $P_x^k = 100$  ГПа,  $d = 2$  нм)

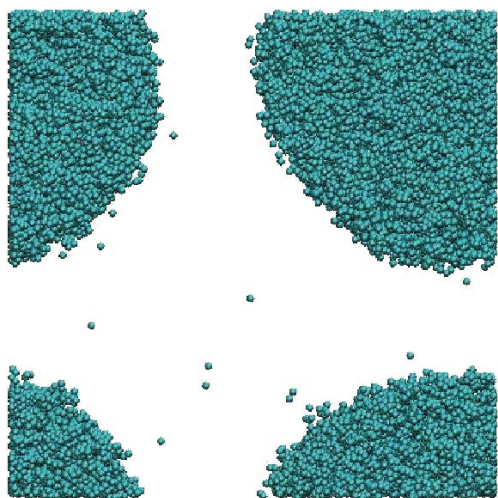


Рис. 12

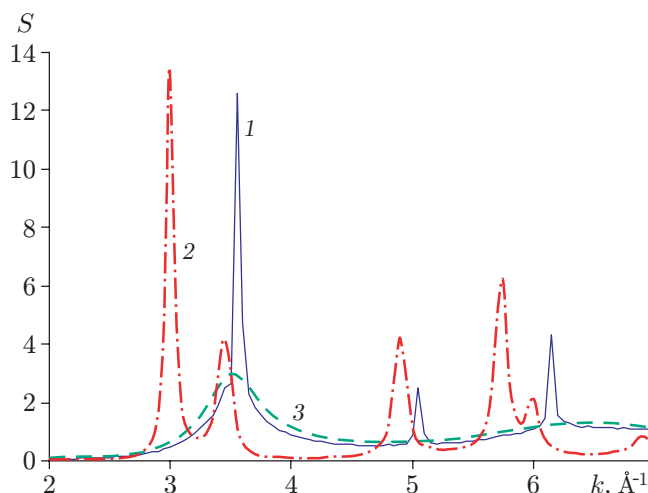


Рис. 13

Рис. 12. Группа атомов с локальной ОЦК-координацией, образующих цилиндр (с учетом периодических граничных условий), при расчете эволюции поликристалла ( $d = 2$  нм) с помощью алгоритма гюгониостата [17] при  $P_x^k = 200$  ГПа

Рис. 13. Зависимость структурного фактора  $S$  от величины волнового вектора  $k$ , рассчитанная для состояния материала, соответствующего рис. 12:

1 — ОЦК-структура, 2 — ГЦК-структура недеформированного поликристалла, 3 — аморфная фаза вне цилиндра на рис. 12

сти этих атомов (более 95 %) соответствует ОЦК-решетке. Целесообразно провести анализ эволюции структуры ударно-сжатого материала при конечном давлении  $P_x^k = 200$  ГПа, несколько меньшем давления, при котором происходит полное плавление меди за фронтом. В данном случае температура почти в три раза выше (см. рис. 10) и уже за время  $t = 0,3$  нс все атомы с ОЦК-координацией собираются в цилиндр (рис. 12). Материал цилиндра, показанного на рис. 12, имеет ОЦК-решетку, что подтверждают результаты вычисления структурного фактора (рис. 13). Согласно кристаллографической классификации максимумы на рис. 13 являются (110)-, (200)- и (211)-рефлексами для ОЦК-кристалла с параметром решетки, равным 0,25 нм. Результаты расчетов структурного фактора и коэффициента диффузии отдельно внутри и вне цилиндра показывают, что вне цилиндра атомы не упорядочены (см. рис. 13), а коэффициент диффузии приблизительно в 100 раз больше. Следовательно, в области вне цилиндра, показанного на рис. 12, находится жидкая фаза, вблизи которой расположена твердая ОЦК-фаза. В процессе эволюции граница раздела между этими фазами приняла форму цилиндра с осью, направленной вдоль направления, в котором происходило сжатие, что вызвано минимизацией межфазной границы. Для подтверждения того, что образование ОЦК-решетки меди в ударно-сжатом состоянии не обусловлено применением алгоритма гюгониостата, проведены расчеты распространения ударной волны, возбуждаемой с помощью ударника (рис. 14). Рис. 14 соответствует моменту времени, когда волна приближается к левому краю расчетной ячейки. Несмотря на то что время прохождения ударной волны по расчетной ячейке слева направо составляло около 7 пс, можно заметить образование ОЦК-кластеров за фронтом ударной волны.

Тот факт, что в расчетах методом МД при давлении более 100 ГПа и температуре выше 2000 К стабильной оказывается именно ОЦК-, а не ГЦК-фаза, не был отмечен в литературе, несмотря на то что в работах [19, 20] расчеты также проводились для режима

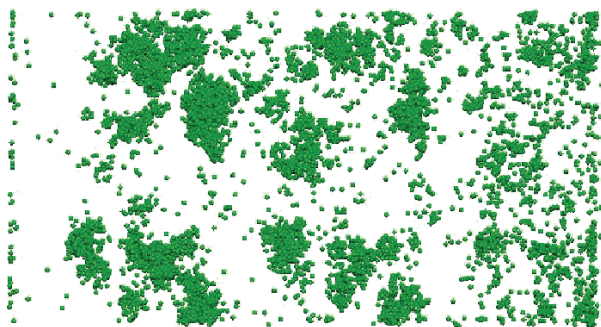


Рис. 14. Расположение атомов с локальной ОЦК-координацией в поликристалле ( $d = 2$  нм), вдоль которого слева направо распространяется ударная волна ( $P_x = 200$  ГПа)

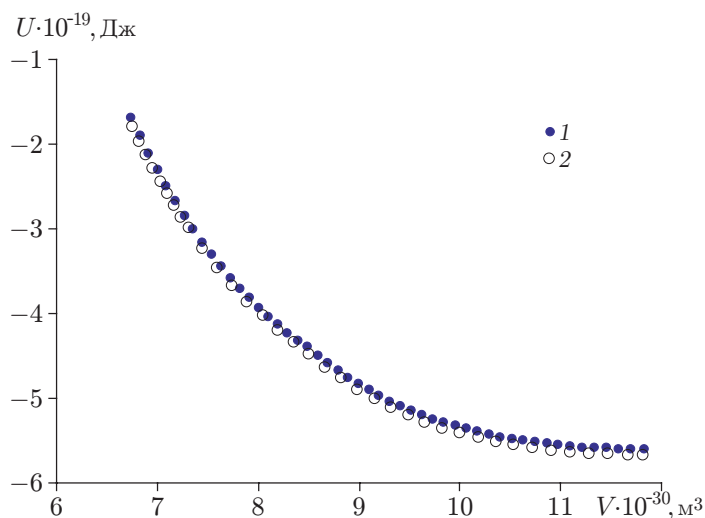


Рис. 15. Зависимость энергии ОЦК-решетки (1) и ГЦК-решетки (2) при  $T = 0$  К в расчете на один атом  $U$  от объема  $V$ , занимаемого одним атомом, рассчитанная с использованием потенциала, приведенного в [11]

распространения ударной волны, близкого к режиму полного плавления, с использованием того же потенциала межатомного взаимодействия [11]. Возможно, это вызвано применением в [19, 20] для определения полученного фазового состояния только парной корреляционной функции и параметра центральной симметрии [21]. Для проведения структурного анализа при очень высоких температурах этих параметров недостаточно. Также следует отметить, что при низких температурах стабильной является именно ГЦК-структура. Это подтверждают результаты сравнения энергий ГЦК- и ОЦК-решеток при  $T = 0$  К (рис. 15). Вплоть до значения давления  $P = 300$  ГПа энергия ГЦК-решетки меньше. Это означает, что при  $T = 0$  К всегда стабильной будет только ГЦК-структура, фазовый переход между ГЦК- и ОЦК-структурами при заданном давлении будет происходить при некоторой конечной температуре, для вычисления которой нужно знать зависимость энтропии ГЦК- и ОЦК-кристаллов от давления и температуры. Также возникает вопрос, существует ли связь между стабильностью ОЦК-фазы и выбором потенциала межатомного взаимодействия [11]. Проведены тестовые расчеты для поликристаллов меди, взаимодействие атомов в которых описывалось двумя другими известными потенциалами [22, 23]. Несмотря на то что при использовании потенциалов [22, 23] параметры ударной адиабаты

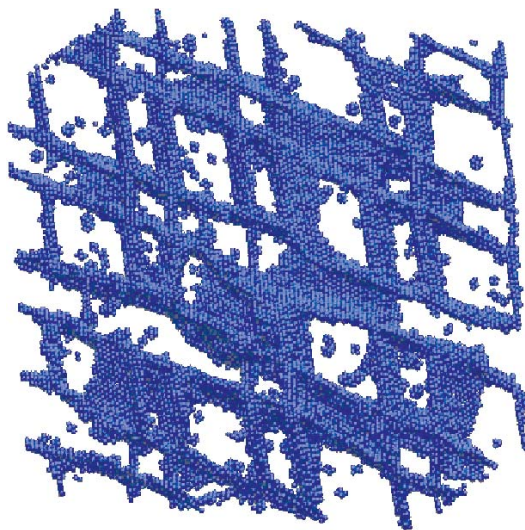


Рис. 16. Расположение атомов, локальная координация которых соответствует неупорядоченной фазе, в результате разгрузки ударно-сжатой меди до температуры  $T = 300$  К и давления  $P = 10^5$  Па

и давление в ударной волне, при котором происходит плавление материала за фронтом, отличаются от данных для потенциала [11], приведенных в настоящей работе, в обоих случаях в расчетах методом МД ударно-волнового сжатия поликристаллической меди обнаружено формирование ОЦК-фазы за фронтом ударной волны при давлениях, меньших давления, необходимого для полного плавления меди.

Образовавшийся в результате разгрузки (понижения температуры и давления) объем ОЦК-фазы ударно-сжатой меди увеличивается, постепенно занимая практически всю расчетную ячейку. При температуре  $T = 1150$  К и давлении  $P = 66$  ГПа ОЦК-решетка теряет устойчивость. Температура и давление перехода зависят как от скорости, так и от режима разгрузки. Переход происходит сразу во всем объеме расчетной ячейки, в результате в системе образуется ГЦК-решетка меди с большой плотностью дефектов упаковки. Кроме того, границы между кристаллитами меди имеют ячеистую структуру (рис. 16). Температура и давление фазового перехода, а также особенности возникающей в результате разгрузки структуры существенно зависят от скорости уменьшения температуры и давления.

**Заключение.** В работе предложен подход, позволяющий моделировать образование поликристаллических материалов из расплава путем его охлаждения. С помощью данного подхода получены атомные конфигурации меди, соответствующие поликристаллам со средним размером зерна от 2 до 16 нм. С использованием метода МД проведено исследование изотермического одноосного растяжения и сжатия полученных поликристаллов. Показано, что с уменьшением среднего диаметра зерна в нанокристаллической меди при  $d < 10$  нм модуль Юнга и предел текучести уменьшаются. Построены ударные адиабаты для поликристаллической меди. Установлено, что средний размер зерна в поликристаллической меди оказывает незначительное влияние на кривые скорость ударной волны — скорость ударника и давление — плотность за фронтом. Для материала с размером зерна около 2 нм температура за фронтом на 10 % выше, чем для материала с большим размером зерна. В расчетах методом МД за фронтом ударной волны с давлением от 100 до 200 ГПа обнаружено присутствие меди с ОЦК-решеткой. В результате разгрузки данная структура становится нестабильной и переходит в ГЦК-структуру с большим количеством дефектов

упаковки. Присутствие данной фазы может являться причиной возникновения ячеистой кристаллической структуры в разгруженном материале.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Hall E. O.** The deformation and ageing of mild steel: III discussion of results // Proc. Phys. Soc. London. Ser. B. 1951. V. 64. P. 747–753.
2. **Petch N. J.** The cleavage strength of polycrystals // J. Iron Steel Inst. 1953. V. 174. P. 25–28.
3. **Sanders P. G., Eastman J. A., Weertman J. R.** Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium // Acta Mater. 1997. V. 45. P. 4019–4025.
4. **Schuh C. A., Nieh T. G., Iwasaki H.** The effect of solid solution W additions on the mechanical properties of nanocrystalline Ni // Acta Mater. 2003. V. 51. P. 431–443.
5. **Chokshi A. H., Rosen A., Karch J., Gleiter H.** On the validity of the hall-petch relationship in nanocrystalline materials // Scripta Metall. 1989. V. 23. P. 1679–1683.
6. **Conrad H., Narayan J.** Mechanism for grain size softening in nanocrystalline Zn // Appl. Phys. Lett. 2002. V. 81. P. 2241–2243.
7. **Schiøtz J., Jacobsen K. W.** A maximum in the strength of nanocrystalline copper // Science. 2003. V. 301. P. 1357–1359.
8. **Куксин А. Ю., Стегайлов В. В., Янилкин А. В.** Атомистическое моделирование пластичности и разрушения нанокристаллической меди при высокоскоростном растяжении // Физика твердого тела. 2008. Т. 50, № 11. С. 1984–1990.
9. **Jarmakani H. N., Bringa E. M., Erhart P., et al.** Molecular dynamics simulations of shock compression of nickel: From monocrystals to nanocrystals // Acta Mater. 2008. V. 56. P. 5584–5604.
10. **Fensin S. J., Brandl C., Cerreta E. K., et al.** Nanoscale plasticity at grain boundaries in face-centered cubic copper under shock loading // JOM. 2013. V. 65, N 3. P. 410–418.
11. **Mishin Y., Mehl M. J., Papaconstantopoulos D. A., et al.** Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // Phys. Rev. B. 2001. V. 63. 224106.
12. **Plimpton S. J.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. P. 1–19.
13. **Hoover W. G.** Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions // Phys. Rev. A. 1985. V. 31. P. 1695–1697.
14. **Shinoda W., Shiga M., Mikami M.** Rapid estimation of elastic constants by molecular dynamics simulation under constant stress // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. 134103.
15. **Faken D., Jonsson H.** Systematic analysis of local atomic structure combined with 3d computer graphics // Comput. Mater. Sci. 1994. V. 2. P. 279–286.
16. **Tsuzuki H., Branicio P. S., Rino J. P.** Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood // Comput. Phys. Comm. 2007. V. 177. P. 518–523.
17. **Ravelo R., Holian B. L., Germann T. C., Lomdahl P. S.** Constant-stress Hugoniot method for following the dynamical evolution of shocked matter // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. 014103.
18. **Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ /** Под ред. Р. Ф. Трунина. 2-е изд., перераб. и доп. Саров: Всерос. науч.-исслед. ин-т эксперим. физики, 2006.
19. **Bringa E. M., Cazamias J. U., Erhart P., et al.** Atomistic shock Hugoniot simulation of single-crystal copper // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. P. 3793–3799.

20. **Levitas V. I., Ravelo R.** Virtual melting as a new mechanism of stress relaxation under high strain rate loading // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 2012. V. 109, N 33. P. 13204–13207.
21. **Kelchner C. L., Plimpton S. J., Hamilton J. C.** Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 11085–11088.
22. **Cai J., Ye Y. Y.** Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 8398–8410.
23. **Zhou X. W., Wadley H. N. G., Johnson R. A., et al.** Atomic scale structure of sputtered metal multilayers // Acta Mater. 2001. V. 49. P. 4005–4015.

*Поступила в редакцию 28/X 2013 г.*

---