

PACS numbers: 61.43.Bn, 61.72.Bb, 61.72.J-, 62.20.Fq, 62.25.Mn, 81.40.Lm, 83.50.Na

## **Комп'ютерне моделювання механізму виникнення локалізованих синергетичних дефектних субструктур при пластичній деформації нанокристалів металів**

О. С. Гаценко, О. Е. Засимчук, П. О. Теселько\*, С. Г. Стіренко\*\*,  
Ю. Г. Гордієнко

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,  
бульв. Акад. Вернадського, 36,  
03680, МСП, Київ-142, Україна*

*\*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
просп. Академіка Глушкова, 4,  
03680, МСП, Київ, Україна*

*\*\*Центр суперкомп'ютерних обчислень  
Національного технічного університету України «КПІ»,  
просп. Перемоги, 37/6,  
03056 Київ, Україна*

Комп'ютерне моделювання процесів пластичної деформації для нанокристалів металів із ГЦК-ґратницею (Al, Cu, Pt) виконано методом молекулярної динаміки із використанням нових методик інтенсивних обчислень на основі технологій «наукового шлюзу» (Science Gateway) і WS-PGRADE/gUSE, ґрид-інфраструктур «сервісний ґрид» (Service Grid) і «настільний ґрид» (Desktop Grid). Знайдено нові риси еволюції невпорядкованого розташування атомів (так званих атом-вакансійних станів), які виникають у процесі одновісного монотонного навантаження ідеальних нанокристалів кубічної орієнтації. Показано, що колективна перебудова розташування атом-вакансійних станів призводить до значних змін усереднених значень напружень. Внаслідок еволюції атом-вакансійних станів утворюються колективні самоорганізовані зони локалізації напружень, які мають вигляд квазіперіодичних смуг із різними кількісними параметрами для різних металів (товщина, період, момент утворення), проте із однаковими якісними ознаками (некристалографічний напрямок, еволюція, нахил, наскрізне розташування в об'ємі, вихід на поверхню). Моделювані смуги неоднорідного розподілу напружень трактуються як провідники утворення смуг корельованого переміщення груп атом-вакансійних (або сильно збуджених) станів, тобто каналів неоднорідної локалізованої (гідродинамічної) пластичної течії на найнижчому (нанометровому) масштабному рівні. При подальшій еволюції такі смуги мо-

жуть ставати носіями гідродинамічних мод деформації на мікроскопічному та макроскопічному рівнях, що спостерігалось в експериментах різних наукових груп. Моделюванням результатів рентгенографічної аналізи показано, що зі збільшенням ступеня деформації відбувається зменшення інтенсивності дифракційних піків та їх зсув, що свідчить про присутність дефектів точкового типу. Таким чином, в якісному сенсі можна зробити висновок щодо правильності трактування неупорядкованих положень атомів у даній роботі, а саме, як точкових дефектів із властивостями атом-вакансійних станів. На основі викладених результатів та їх обговорення робиться висновок, що пластична деформація нанокристалів ГЦК-металів в умовах, коли дислокаційне ковзання неможливе, здійснюється шляхом локалізованої гідродинамічної течії речовини по каналах з нещільною некристалічною (рідиноподібною) структурою за механізмом утворення метастабільних точкових дефектів атом-вакансійного типу, їх еволюції і самоорганізації в смуги локалізації на більших масштабних рівнях.

Компьютерное моделирование процессов пластической деформации для нанокристаллов металлов с ГЦК-решёткой (Al, Cu, Pt) выполнено методами молекулярной динамики с использованием новых методик интенсивных вычислений на основе технологий «научного шлюза» (Science Gateway) и WS-PGRADE/gUSE, грид-инфраструктур «сервисный грид» (Service Grid) и «настольный грид» (Desktop Grid). Найдены новые черты эволюции неупорядоченного расположения атомов (так называемых атом-вакансионных состояний), которые возникают в процессе одноосного монотонного нагружения идеальных нанокристаллов кубической ориентации. Показано, что коллективная перестройка расположения атом-вакансионных состояний приводит к значительным изменениям усреднённых значений напряжений. В результате эволюции атом-вакансионных состояний образуются коллективные самоорганизующиеся зоны локализации напряжений, которые имеют вид квазипериодических полос с различными количественными параметрами для разных металлов (толщина, период, момент образования), однако с одинаковыми качественными признаками (некристаллографическое направление, эволюция, наклон, сквозное расположение в объёме, выход на поверхность). Моделируемые полосы неоднородного распределения напряжений трактуются как предвестники образования полос коррелированного перемещения групп атом-вакансионных (или сильно возбуждённых) состояний, т.е. каналов неоднородного локализованного (гидродинамического) пластического течения на низком (нанометровом) масштабном уровне. При дальнейшей эволюции такие полосы могут стать носителями гидродинамических мод деформации на микроскопическом и макроскопическом уровнях, что наблюдалось в экспериментах различных научных групп. Моделированием результатов рентгенографического анализа показано, что с увеличением степени деформации происходит уменьшение интенсивности дифракционных пиков и их смещение, что свидетельствует о присутствии дефектов точечного типа. Таким образом, в качественном смысле можно сделать вывод о правильности трактовки неупорядоченных положений атомов в данной работе, а именно, как точечных дефектов со свойствами атом-вакансионных состояний. На основе изложенных результатов и их обсуждения делается вывод, что пластическая деформация

нанокристаллов ГЦК-металлов в условиях, когда дислокационное скольжение невозможно, осуществляется путём локализованного гидродинамического течения вещества по каналам с неплотной некристаллической (жидкостнообразной) структурой по механизму образования метастабильных точечных дефектов атом-вакансионного типа, их эволюции и самоорганизации в полосы локализации на больших масштабных уровнях.

Computer modeling of plastic deformation of f.c.c.-metal (Al, Cu, Pt) nanocrystals is performed by the molecular dynamics method using the new techniques for high-performance computing on the basis of 'scientific gateway' (Science Gateway) and WS-PGRADE/gUSE technologies, 'service grid' and 'desktop grid' infrastructures. The new features of evolution are revealed for irregular atomic arrangements (i.e. so-called atom-vacancy states), which arise in process of monotonic uniaxial load of nanocrystals in cubic orientation. As shown, the collective restructuring in the ensemble of atom-vacancy states leads to significant changes of the average stress values. As a result of the evolution, the collective self-organized zones of strain localization appear as quasi-periodic bands with various quantitative parameters for different metals (thickness, period, time of formation), but with the same qualitative characteristics (non-crystallographic orientation, evolution, slope, through-bulk arrangement, outcropping). The simulated bands with nonuniform stress distribution are treated as precursors of the correlated movement of groups of atom-vacancy (or highly excited) states, i.e., precursors of inhomogeneous localized (hydrodynamic) plastic flow in channels at low (nanometre) scale level. With the further evolution, these bands may be the carriers of the hydrodynamic deformation modes at the micro- and macroscale levels, which have been observed in the experiments by various research groups. The simulation of results of X-ray analysis shows that the diffraction peaks decrease and shift with increase of plastic strain that indicates the presence of point defects. Thus, in a qualitative sense, we can conclude that the interpretation of the irregular atomic arrangements in this work as the point defects with the properties of the atom-vacancy states is correct. On the basis of these results and their discussion, it is concluded that plastic deformation of nanocrystals of f.c.c. metals under conditions, when dislocation slip is impossible, is realized by the localized hydrodynamic flow of matter in channels with loosely packed noncrystalline (liquid-like) structure by means of generation of metastable point defects of atom-vacancy type, their evolution and self-organization in the localized bands at the larger scales.

**Ключові слова:** пластична деформація, масоперенесення, дефектні субструктури, нанокристали, синергетика, комп'ютерне моделювання, рентгенографічна аналіза.

*(Отримано 6 серпня 2013 р.; остаточний варіант — 28 серпня 2014 р.)*

## 1. ВСТУП

Сучасне загальноприйняте уявлення щодо носіїв пластичної деформації в кристалічних матеріалах базується на дефектах криста-

лічної ґратниці класичного типу, тобто на вакансіях, міжвузлях, дислокаціях, дисклинаціях, дефектах пакування, двійниках, тощо. Проте в умовах значної пластичної деформації в зонах локалізації деформації густина дефектів може стрімко зростати, що призводить до значного спотворення кристалічної ґратниці і виникнення значних неупорядкованих груп атомів. Це до деякої міри виключає можливість розвитку деформації за рахунок окремих класичних дефектів. Враховуючи, що в таких умовах пластична деформація відбувається далеко від термодинамічної рівноваги, можна припустити, що подальша деформація може відбуватися іншим шляхом, коли можливе самоорганізоване (синергетичне) структуроутворення в ансамблі локалізованих груп атомів. Такий механізм деформації був запропонований нами в роботі [1], а носіями пластичності вважалися елементи смугової структури різних масштабних рівнів (так звані *microbands*, *shear bands*), виникнення яких спостерігалось експериментально в процесі прокатки монокристалів нікелю. Внутрішня структура цих елементів мала ознаки аморфної (рідиноподібної) поведінки, що сприяло гідродинамічній течії матеріялу і забезпечувало пластичну формозміну в напрямках смуг. Подальше вивчення механізму синергетичного структуроутворення в нерівноважних умовах локалізованої пластичної деформації кристалів було виконано на монокристалах алюмінію різної кристалографічної орієнтації по відношенню до напрямку механічного навантаження [2–6]. Експериментально було показано, що при втомному навантажуванні зразків із орієнтацією  $\langle 010 \rangle \{010\}$  (де  $\langle 010 \rangle$  позначає напрямок навантаження, а  $\{010\}$  площину рухомих захватів), що сприяє активації множинного ковзання, в ділянках локалізованої пластичності також спостерігаються ознаки синергетичного структуроутворення. До такого висновку автори прийшли, досліджуючи поверхневий рельєф монокристалів, жорстко скріплених з полікристалічними зразками при їх навантаженні. Деформаційний рельєф на поверхні монокристалів не відповідав слідам дислокаційного ковзання ні за своєю складною внутрішньою структурою, ні за орієнтацією по відношенню до напрямку прикладеного зовнішнього навантаження. Крім того, на поверхні, поєднаній з полікристалічним зразком, також спостерігався рельєф, що повністю збігався з рельєфом вільної поверхні. Це дозволило зробити висновок, що поверхневий рельєф являє собою слід локалізованого пластичного масоперенесення. Таким чином, в умовах гальмування дислокаційного ковзання пластична деформація може здійснюватися за допомогою перенесення маси по певних неоднорідних ділянках, тобто каналах гідродинамічного течії матеріялу. Такі канали утворюються в процесі навантаження внаслідок самоорганізації матеріялу і мають некристалічну (рідиноподібну) внутрішню структуру, завдяки якій можливий гомогенний перенос речовини. Оскільки після зняття навантаження відбувається кристалізація

такої структури, то спостерігати в розвантаженому деформованому матеріалі канали гідродинамічної течії вдається або за рельєфом поверхні (у разі монокристалів певної орієнтації див. вище), або прямими структурними дослідженнями (наприклад, методом трансмісійної електронної мікроскопії — ТЕМ) завдяки зміні їх морфології [7–10]. Слід зазначити, що утворенню каналів гідродинамічної течії в процесі навантаження сприяє різка зміна параметрів зовнішнього механічного поля, що, як випливає з експериментів, призводить до миттєвого підвищення пластичності матеріалу [8–10]. Отже, механізм пластичної деформації реальних кристалічних матеріалів, що містять дефекти кристалічної будови і хімічну неоднорідність у вигляді розчинних домішок і включень другої фази, в процесі навантаження може змінюватися від однорідного дислокаційного ковзання (на ранніх стадіях пластичної деформації) до аномального масоперенесення в неоднорідних зонах локалізації (на стадіях розвинутої пластичної деформації). Останній процес локалізується в пов'язаних між собою каналах гідродинамічної течії і обумовлюється колективною взаємодією і самоорганізацією дефектів кристалу, тобто утворенням синергетичної структури. Враховуючи той експериментальний факт, що утворення каналів сприяє продовженню і навіть інтенсифікації пластичної течії матеріалу, що знаходиться під навантаженням, можна зробити висновок, що внутрішня структура каналів сприяє течії речовини. Це може відбуватися за умови існування нещільного або рідиноподібного розташування атомів, яке відрізняється від ідеальної кристалічної структури металу і характеризується наявністю великої кількості точкових збурень у положеннях атомів, тобто точкових дефектів. Якщо утворення каналів (самоорганізації) передують істотно пластична деформація, як, наприклад, при прокатці моно- і полікристалічного нікелю і алюмінію [1, 11, 12], то множинне утворення точкових дефектів вакансійного типу з подальшою їх самоорганізацією у вигляді зародків каналів може бути обумовлено рухом гвинтових дислокацій зі сходами [13]. Однак, якщо дислокаційне ковзання гальмується поблизу межі пружності, як у випадку ГЦК-монокристалів кубічного орієнтування, дислокаційний механізм утворення вакансій не ефективний.

Виникає природне запитання: який механізм відповідальний за утворення каналів гідродинамічної течії із нещільним або рідиноподібним розташуванням атомів у подібних випадках? З відомих літературних джерел варто відзначити кілька теоретичних підходів до вивчення проблеми подібних неупорядкованих станів. Можливість виникнення точкових дефектів нового типу, а саме, так званих «атом-вакансійних станів» [14] і «сильно збуджених станів» [15] у металевих кристалах, було показано в деяких теоріях динаміки пластичної деформації [14, 15]. Умови існування подібних дефектів точкового типу у вигляді метастабільних просторово локалі-

зованих мод (МПЛМ; Intrinsic Localized Mode—ILM) та дискретних брізерів (ДБ; Discrete Breather—DB) останнім часом також інтенсивно вивчаються теоретичними і експериментальними методами [16, 17]. З експериментальної точки зору пряме спостереження умов швидкого виникнення метастабільного рідиноподібного розташування атомів під дією інтенсивного зовнішнього впливу є принципово неможливим із застосуванням сучасного обладнання. З теоретичної точки зору проблема є суттєво нелінійною, і жодних теоретичних метод вивчення її динаміки немає. Проте не зважаючи на брак прямих експериментальних даних і точних теоретичних моделей з цього питання, перспективним видається використання сучасних засобів комп'ютерного моделювання, наприклад метод молекулярної динаміки. Необхідність і зручність комп'ютерного моделювання обумовлена також тим, що експериментальне вивчення деформаційного структуроутворення (самоорганізації) повинно виконуватися не на розвантажених зразках, коли протікають релаксаційні процеси, спотворюючи деформаційну структуру, а під час навантаження, коли ця структура виникає. При цьому необхідно враховувати, що утворення синергетичної структури відбувається кооперативно на різних масштабних рівнях за дуже малий час (частки пікосекунди), що не дозволяє їх експериментально спостерігати на сучасному технічному рівні.

## 2. МЕТОДИКА КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Для моделювання розвитку дефектної структури використовувалася метода молекулярної динаміки (МД; Molecular Dynamics—MD). Для виконання МД-моделювання потрібно врахувати кілька факторів: відповідний потенціал міжатомної взаємодії, початкові і крайові умови, умови термалізації (підтримання модельованого теплового режиму). В даній роботі моделювалися бездефектні у вихідному стані зразки з геометричними розмірами  $6,4 \times 6 \times 1,6$  нм. За умовами термалізації температура нанокристалу підтримувалась на рівні 300 К. Кількість атомів становила приблизно  $2,5 \cdot 10^5$ . Варто зазначити, що вказана кількість атомів хоч зазвичай і використовується при моделюванні на надпотужних комп'ютерах, все ж незрівнянно мала в порівнянні з числом Авогадро. В реальних умовах поведінка ансамблю атомів залежить від великої кількості ( $\sim 10^{23}$ ) довкілних атомів, які не можуть бути явно включені в моделювання. Вплив цих атомів можна наближено врахувати за допомогою відповідних крайових умов. В даній роботі використовувалися періодичні крайові умови з урахуванням розміру зразків. Оскільки для обчислення такої кількості атомів і різних сценаріїв необхідна велика кількість ресурсів, то обчислення виконувалися із використанням наукового порталу 'IMP Science Gateway' (<http://scigate.imp.kiev.ua>) [18] на

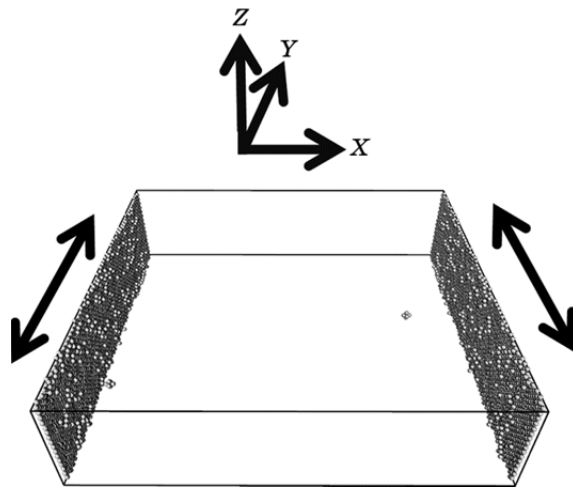
базі технологій WS-PGRADE/ gUSE [19] для складання багатостадійної схеми виконання моделювання фізичного процесу і прозорого доступу до неоднорідних обчислювальних ресурсів кластера ІМФ ім. Г. В. Курдюмова НАНУ (<http://pamela.imp.kiev.ua>), Центру суперкомп'ютерних обчислень Національного технічного університету України «КПІ» (<http://hpc.kpi.ua>) та глобальної інфраструктури середовища розподілених обчислень «SLinCA@Home» на базі настільного ґрідів (<http://dg.imp.kiev.ua/slinca>) [20] та сервісного ґрідів «Український національний ґрід». Методику використання неоднорідних обчислювальних ресурсів, способи оптимізації ресурсів і робочі потоки виконання обчислювальних завдань докладно було описано раніше [20–22]. В даному контексті варто зазначити успішну практичну перевірку метод оптимізації виконання завдань різної тривалості із різними вимогами до ресурсів. В умовах стандартних квот користувачів із кількома типами черг (із різною кількістю доступних процесорів, об'ємом оперативної пам'яті, часом обчислення) вдалося розробити ефективну схему виконання завдань для зразків нанокристалів із різними розмірами (різною кількістю атомів) і різними умовами фізичного процесу (тривалістю і швидкістю розтягу). Окремим перспективним резервом для оптимізації стала розроблена і втілена дворівнева система управління апаратними і програмними засобами в кластерних системах [22].

Для МД-моделювання використовувався МЗА-потенціал міжатомової взаємодії за методом зануреного атома (МЗА; embedded atom method—ЕАМ) для Al [23] та ТЕС-потенціал міжатомної взаємодії багатьох атомів, відомий з теорії ефективного середовища (ТЕС; Effective Medium Theory—ЕМТ) для Cu і Pt [24]. Це надзвичайно важливий аспект методики, оскільки необхідно, щоб взаємодія атомів металів моделювалася на основі взаємодії багатьох атомів, тобто таких потенціалів як МЗА-потенціал або ТЕС-потенціал. Як відомо, прості (і швидкі в обчисленнях) потенціали парної взаємодії, наприклад потенціал Леннарда-Джонса, добре описують тверді шляхетні гази, проте неадекватно моделюють металеві системи. МЗА-потенціали і ТЕС-потенціали широко застосовуються в моделюванні металевих систем, оскільки при відносній простоті уможливають побудувати реалістичний модель. Як об'єкт моделювання було використано монокристали ГЦК-металів (Al, Cu, Ni, Pt, тощо). Під час моделювання обраховувалися наступні кількісні параметри: енергія парної взаємодії, температура, загальний кумулятивний тиск, тензор тиску, тензор напружень. Комп'ютерне моделювання виконувалось за допомогою пакета програмного забезпечення LAMMPS [25], а візуалізація координат атомів — за допомогою алгоритмів і пакетів VMD [26] і Ovito [27]. Умовами моделювання передбачався одновісний розтяг зразків з орієнтацією  $\langle 010 \rangle \{010\}$  зі швидкістю навантаження 20 м/с.

Для одновісного монотонного навантаження було обрано наступну геометрію (рис. 1): напрямок навантаження орієнтовано вздовж осі  $Y$ ; рухомі атомарні площини  $ZX$ , до яких прикладене зовнішнє навантаження, відповідають місцям захвату зразка у випробувальній машині; періодичні крайові умови задаються на площинах  $YX$  вздовж осі  $Z$ ; вільні поверхні (площини  $YZ$ ) розташовано на лівому і правому боках зразка.

Для одновісного монотонного навантаження було обрано наступну геометрію (рис. 1): напрямок навантаження орієнтовано вздовж осі  $Y$ , рухомі атомарні площини, до яких прикладене зовнішнє навантаження (відповідають місцям захвату зразка у випробувальній машині), позначено темно-сірим кольором; періодичні крайові умови задаються вздовж осі  $Z$  і перпендикулярно до площини  $YX$ ; вільні поверхні розташовано ліворуч і праворуч від поверхні  $YZ$ .

Атоми рухомих площин позначалися темно-сірим кольором, атоми, що належать до ГЦК-ґратниці, відображались сірим кольором (рис.1, зліва). Для спостереження за розвитком дефектів ці атоми прибиралися (рис. 1, справа), атоми, що належать до точкових дефектів, позначалися світло-сірим кольором. Варто відзначити, що тут і в подальшому викладі роботи під точковими дефектами маються на увазі не класичні точкові дефекти типу вакансій або домішкових атомів, а стани, які порушують періодичність вихідної кристалічної ГЦК-ґратниці і знаходяться в нерегулярному оточенні інших атомів. Детально такі стани (так звані атом-вакансійні



**Рис. 1.** Геометрія зразків в процесі одновісного монотонного навантаження: монокристал у вихідному стані — тут і далі показано лише атоми, які відповідають невпорядкованим розташуванням атомів (дефектам), двоголові стрілки вказують напрямок одновісного розтягу.



стани) вперше було проаналізовано в попередній роботі [28], яку було присвячено комп'ютерному моделюванню методом молекулярної динаміки еволюції дефектної субструктури і механізмів пластичного деформування нанокристалів алюмінію. Як і в попередній роботі, для аналізу окремих атомів і їх оточення у даній роботі було використано атомарну методу — «аналізу найближчих сусідів» (АНС; Common Neighbour Analysis—CNA), яка є дуже корисною саме для кристалічних матеріалів, оскільки вона базується на аналізі топологічного розташування сусідніх атомів відповідно до певних типів кристалічної ґратниці [29].

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ

З метою спостереження за розвитком дефектної субструктури в модельованих зразках були прибрані атоми, що відносяться до ГЦК-ґратниці. Таким чином візуалізувалися лише ті атоми, що відносяться до дефектів (на зображеннях позначені сірим кольором).

Для незначних ступенів деформації (рис. 2) помітно, що дефекти, які утворилися, розподілені хаотично за об'ємом нанокристалу або утворюють відносно невеликі скупчення в місцях концентрації напруг. Зі збільшенням ступеня деформації їх кількість значно зростає, дефекти локалізуються в ансамблі.

На рисунку 3 показано стадію деформації  $\epsilon = 6,67\%$  для орієнтації  $\langle 010 \rangle \{010\}$ , видно присутність великої кількості дефектів типу атом-вакансійних станів, які локалізуються в місцях найбільших концентрацій дотичних напружень  $\tau_{xy}$  (на діагоналях нанокристалу та їх перетині). Як відомо, при одновісному розтягу на площинах, які орієнтовані під кутом  $45^\circ$  до вісі розтягу, величина дотичних напружень  $\tau$  досягає максимального значення  $\tau_{\max} = 0,5\sigma_{yy}$ . Саме це ілюструють діагональні (тобто орієнтовані під кутом  $45^\circ$  до вісі розтягу  $OY$ ) розподіли точкових збурень в положеннях атомів на рис. 3, внаслідок концентрації дотичних напружень  $\tau_{xy}$ . Для дослідження еволюції дефектної субструктури окрім якісної було застосовано кількісну аналізу наступних параметрів: значення тиску вздовж

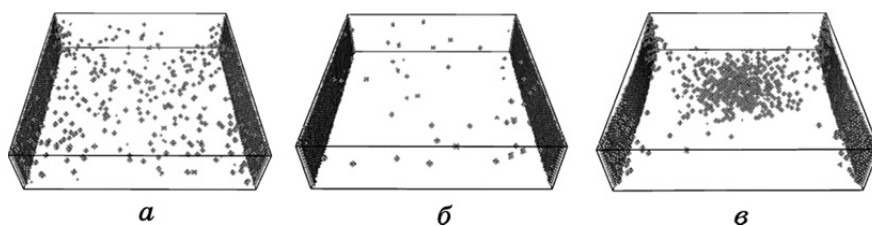


Рис. 2. Розподіл точкових дефектів в об'ємі зразка: Al (а), Cu (б), Pt (в) (орієнтація  $\langle 010 \rangle \{010\}$ , деформація  $\epsilon = 4,66\%$ ).

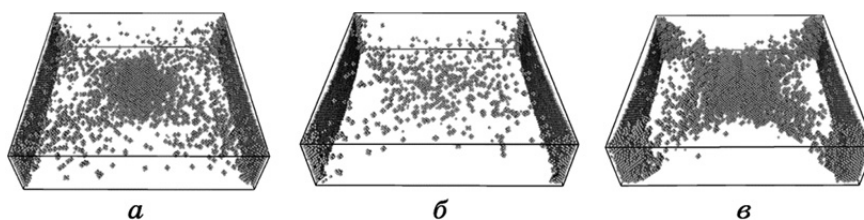


Рис. 3. Розподіл точкових дефектів в об'ємі зразка: Al (а), Cu (б), Pt (в) (орієнтація  $\langle 010 \rangle \{010\}$ , деформація  $\varepsilon = 6,67\%$ ).

головних осей, відносного ступеня деформації, мікронапруження, температури тощо.

### 3.1. Еволюція усереднених напружень

На рисунку 4 наведено розподіли усереднених за всіма атомами значень внутрішнього тиску в модельованих нанокристалах вздовж головних осей. Зміни значень тиску описують зміни напружень, що виникають у нанокристалі під час навантаження. Можна відзначити різкі зміни значень тиску, що свідчить про «стадійність» процесу деформації за рахунок еволюції ансамблю точкових дефектів. Зміцнення зразка змінюється поступовим зменшенням і знову наступним збільшенням мікронапружень. Зміни можуть свідчити про зміну характеру еволюції дефектних утворень. Початкове зростання тиску може пояснюватись пружною деформацією кристалічної ґратниці, після досягнення першого максимуму відбувається наступна релаксація внаслідок утворення точкових дефектів хаотично розташованих в об'ємі нанокристалу, що призводить до зменшення усереднених напружень. Зі збільшенням ступеня деформації значення тиску зростає до другого максимуму, окремі хаотично розташовані дефекти локалізуються в місцях найбільших концентрацій напруг (на діагоналях нанокристалу та їх перетині), що приз-

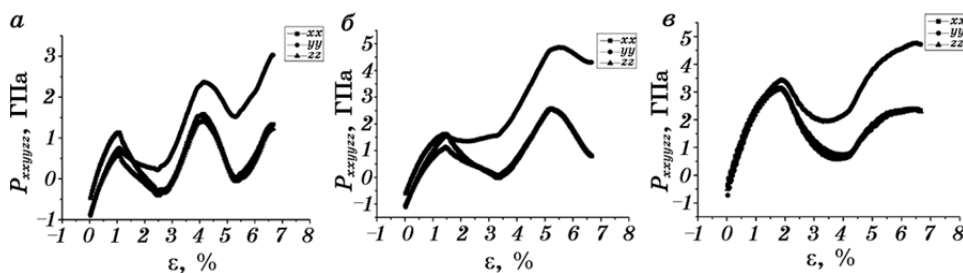


Рис. 4. Розподіл усереднених за всіма атомами значень внутрішнього тиску вздовж головних осей: Al (а), Cu (б), Pt (в).

водить до релаксації системи в цілому. Від'ємні значення на початкових стадіях деформування пояснюються процесами врівноваження на етапі початкової термалізації до кімнатної температури.

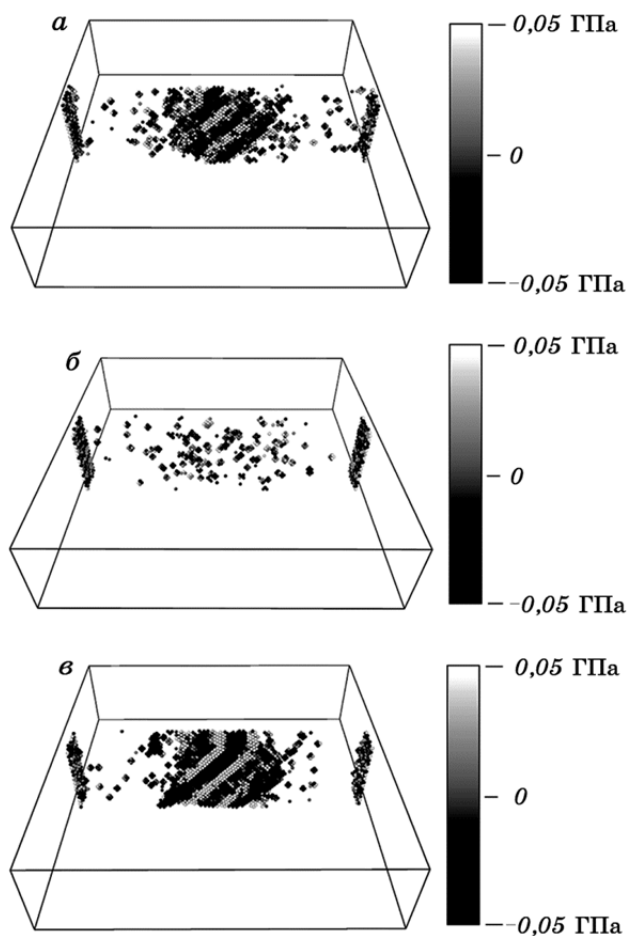
### 3.2. Еволюція локальних мікронапружень в смугах

У низці попередніх робіт [30–33] спостерігалась поява упорядкованого смугового рельєфу на поверхні досліджуваних зразків монокристалів ГЦК-металів з орієнтацією  $\langle 010 \rangle \{010\}$ . Поява та розвиток цього рельєфу опосередковано свідчили про розвиток деформаційних процесів, що відбуваються в об'ємі зразка. Тому цікаво було відстежити значення локальних нормальних напружень  $\sigma_{yy}$  в центрі локалізації найбільшої кількості дефектів (на перетині діагоналей нанокристалу).

Для наочного представлення розподілу локальних значень нормальних напружень  $\sigma_{yy}$  за об'ємом зразка вони відображались різними відтінками сірого кольору (рис. 5). Як видно з рис. 5, з певного моменту часу для різних металів спостерігається кількісно різна, проте якісно однакова поведінка: в перерізі зразка в ансамблі точкових дефектів виникають локальні ділянки у вигляді діагональних смуг з певними однаковими значеннями локальних напруг, які утворюють смугастий контрастний малюнок із чергуванням смуг з мінімальним і максимальним значенням напруги. Смуги перерізають увесь зразок наскрізь і виходять на поверхню зразка. В кількісному сенсі різниця смугастого малюнка для різних металів полягає в різній товщині смуг (наприклад, у алюмінії на рис. 5, *a* смуги більш тонкі, ніж у платині на рис. 5, *в*) і їх періодичності (смуги в алюмінії на рис. 5, *a* мають менший період, ніж смуги у платині на рис. 5, *в*). Варто зазначити, що для деяких металів такий смугастий розподіл локальних напружень в ансамблі дефектів точкового типу спостерігається для дещо вищих значень пластичної деформації (наприклад, для міді на рис. 5, *б* він починається для деформації більше 7%). На базі цих спостережень можна припустити, що наскрізне розташування цих смуг і їх вихід на поверхню зразка є передумовою формування неоднорідного розподілу властивостей в ансамблі дефектів точкового типу із наступним формуванням їх неоднорідного розподілу і подальшим спостереженням у вигляді поверхневого рельєфу на великих ступенях деформації.

### 3.3. Дані моделювання результатів рентгеноструктурної аналізу

Однією з проблем моделювання методом молекулярного моделювання є неможливість прямого порівняння детальної поведінки модельованої системи з реальними зразками, наприклад неможливо порівняти координати збурених атомів у моделю та практичній си-



**Рис. 5.** Візуалізація локальних нормальних напружень  $\sigma_{yy}$  ( $-0,05$ – $0,05$  ГПа) (позначених різним кольором) на перерізі зразка: Al (*a*), Cu (*б*), Pt (*в*); деформація  $\varepsilon = 6,67\%$  (для більшої наочності прибрано два шари атомів на вільних поверхнях  $YZ$ ).

туації. В основному це пов'язано з принциповим технічним обмеженням МД-моделювання за кількістю атомів і часом моделювання.

МД-моделювання уможливорює одержати кількісні параметри системи з великою точністю, в той же час обраховані кількісні параметри не завжди можливо порівняти з реальним експериментом, і часто порівняння відбувається за якісними ознаками. З розвитком метод комп'ютерного моделювання з'явилася можливість виконувати моделювання результатів рентгеноструктурної аналізи для окремих часових станів модельованої системи, що дозволило виконувати порівняння результатів моделювання та реального експе-

рименту із залученням метод рентгенографії. Особливістю модельованих результатів рентгеноструктурної аналізи є необхідність обрахування Фур'є-перетворів для надвеликої кількості координат атомів, яка за часом та вимогами до обчислювальних ресурсів наближається до часу і вимог самого процесу МД-моделювання.

Моделювання результатів рентгеноструктурної аналізи відбувалося за методом обертання [34]. Модельований нанокристал обертався в тривимірному просторі зі спадним на нього змодельованим пучком Рентгенового  $\text{CuK}\alpha$ -випромінення. Розсіяне нанокристалом випромінення обраховувалось і фіксувалося у вигляді дифрактограм (рис. 6). Для кожного із зразків виконувалося по 20 моделювань відповідно до зростання деформації ( $\varepsilon = 0-6,67\%$ ). Одержані дифрактограми в якісному аспекті відповідають результатам рентгеноструктурної аналізи реальних монокристалів, які пластично деформуються.

На рисунку 6 наведено дифрактограми для досліджуваних нанокристалів. У зведених результатах помітно, як зі збільшенням ступеня навантаження відбувається зменшення інтенсивності дифракційних піків та їх незначний зсув, що свідчить про присутність дефектів першого класу за Кривоглазом [35], тобто точкових дефектів (атом-вакансійних станів). Таким чином, в якісному сенсі аналі-

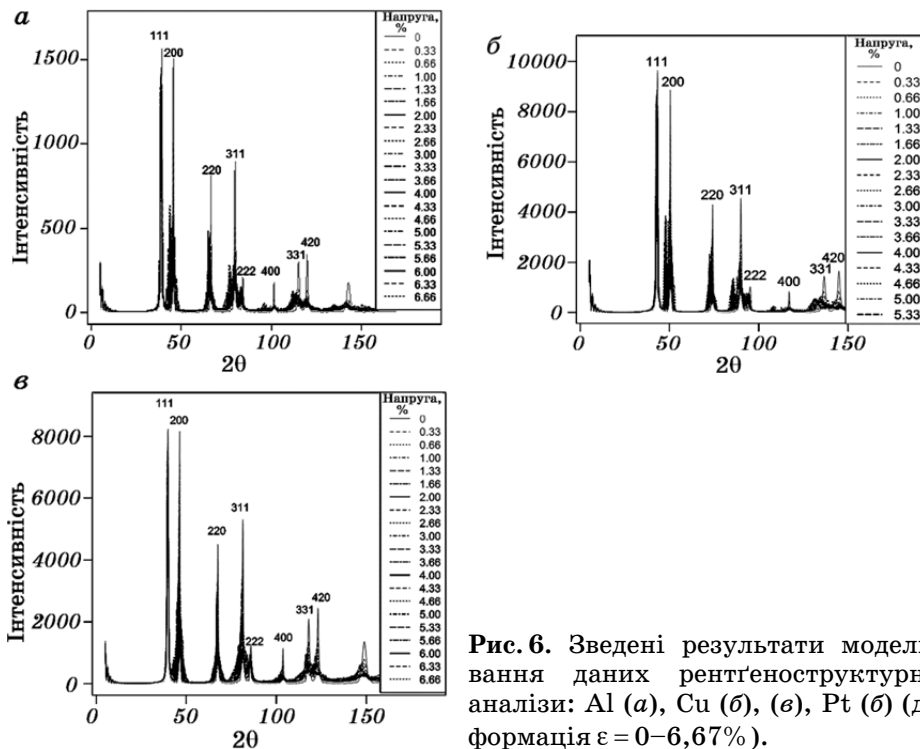


Рис. 6. Зведені результати моделювання даних рентгеноструктурної аналізи: Al (а), Cu (б), Pt (в) (деформація  $\varepsilon = 0-6,67\%$ ).

зуючи результати моделювання даних рентгеноструктурної аналізи, можна зробити висновок щодо правильності трактування неупорядкованих положень атомів у даній роботі, а саме, як точкових дефектів із властивостями атом-вакансійних станів. Подальша більш точна статистична аналіза (яка вимагає значно більших на кілька порядків обчислювальних ресурсів) модельованих результатів рентгеноструктурної аналізи надасть можливість кількісно характеризувати розвиток дефектної субструктури та виконувати порівняння з відомими теоретичними результатами і експериментами на реальних зразках.

#### 4. ВИСНОВКИ

Виконане МД-моделювання продемонструвало нові риси еволюції так званих атом-вакансійних станів у процесі одновісного монотонного навантаження ідеальних нанокристалів металів із ГЦК-ґратницею (Al, Cu, Pt) кубічної орієнтації. Показано, що в ансамблі атом-вакансійних станів утворюються колективні самоорганізовані моди локалізації напружень, які мають вигляд квазіперіодичних смуг із різними кількісними параметрами (товщина, період, часовий момент утворення), проте із однаковими якісними ознаками (некристалографічний напрямок, еволюція, нахил, наскрізне розташування в об'ємі, вихід на поверхню). Модельовані смуги неоднорідного розподілу напружень можна розглядати як провісники утворення каналів гідродинамічної пластичної течії на найнижчому (нанометровому) масштабному рівні, які при подальшій еволюції можуть стати носіями гідродинамічних мод деформації на мікроскопічному і макроскопічному рівні, що спостерігалось в численних експериментах багатьох наукових груп [1, 2, 5, 10, 15]. Варто зауважити, що моделювання виконано для нанокристалів лише з певними розмірами і умовами термалізації, а також із використанням періодичних крайових умов. Тому для порівняння одержаних кількісних параметрів смуг локалізації із експериментальними даними необхідно виконати додаткове масштабне моделювання і строге статистичне дослідження впливу розмірного ефекту, умов термалізації і періодичних крайових умов на якісні і кількісні показники дослідженого механізму еволюції ансамблю дефектів. Моделюванням результатів рентгенографічної аналізи продемонстровано практичну можливість кількісного порівняння модельованих параметрів еволюції атом-вакансійних станів і параметрів рентгенографічної аналізи в межах теорій впливу точкових дефектів на форму і розташування піків на дифрактограмах експериментальних зразків в умовах пластичної деформації. Резюмуючи викладені результати та їх обговорення, можна стверджувати, що при механічному навантаженні монокристалів ГЦК-металів (Al, Cu, Pt) кубіч-

ного орієнтування в умовах, коли дислокаційне ковзання практично не відбувається, пластична деформація здійснюється шляхом локалізованої гідродинамічної течії речовини по каналах з нецільною некристалічною (рідиноподібною) структурою за рахунок утворення метастабільних точкових дефектів атом-вакансійного типу, їх еволюції і самоорганізації у надструктури (смуги локалізації напружень) на більших масштабних рівнях.

## 5. ПОДЯКИ

Роботу виконано в межах теми «Використання ґрід-технологій для дослідження динамічної поведінки металів при деформації та електронної структури металовмісних сполук» Державної цільової науково-технічної програми впровадження і застосування ґрід-технологій на 2009–2013 роки і при частковій підтримці проєкту EU FP7 SCI-BUS (SCIENTIFIC GATEWAY BASED USER SUPPORT) RI-283481 (<http://www.sci-bus.eu>) 7-ї Рамкової Програми Європейського Союзу.

## ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. E. E. Zasimchuk and L. I. Markashova, *Mater. Sci. Eng. A*, **127**, No. 1: 33 (1990).
2. Yu. G. Gordienko, R. G. Gontareva, J. S. Schreiber, E. E. Zasimchuk, and I. K. Zasimchuk, *Adv. Eng. Mater.*, **8**, No. 10: 957 (2006).
3. E. E. Zasimchuk, Yu. G. Gordienko, R. G. Gontareva, and I. K. Zasimchuk, *J. Mater. Eng. Perf.*, **12**, Iss. 10: 69 (2003).
4. Yu. G. Gordienko, E. E. Zasimchuk, and R. G. Gontareva, *J. Mater. Sci. Lett.*, **22**, No.3: 241 (2003).
5. Yu. G. Gordienko, E. E. Zasimchuk, R. Gontareva, and V. Alexandrov, *Int. J. Eng. Simul.*, **1**, No. 3: 2 (2000).
6. P. V. Kuznetsov, I. V. Petrakova, Y. G. Gordienko, E. E. Zasimchuk, and V. L. Karbovskii, *Phys. Mesomech.*, **12**, No. 1: 85 (2009).
7. E. E. Zasimchuk, Yu. G. Gordienko, L. Markashova, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Perf.*, **18**, Iss. 7: 947 (2009).
8. E. Zasimchuk, L. Markashova, O. Baskova, T. Turchak, N. Chausov, V. Hutsaylyuk, and V. Berezin, *J. Mater. Eng. Perf.*, **22**, Iss. 11: 3421 (2013).
9. Е. Э. Засимчук, Л. И. Маркашова, Т. В. Турчак, Н. Г. Чаусов и др., *Физическая мезомеханика*, **12**, № 2: 77 (2009).
10. Н. Чаусов, Е. Засимчук, Л. Маркашова, В. Вильдеман и др., *Техническая диагностика и неразрушающий контроль*, **4**: 54 (2008).
11. E. Zasimchuk, Yu. Gordienko, L. Markashova, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Perf.*, **18**, Iss. 7: 947 (2009).
12. Е. Э. Засимчук, Ю. Г. Гордиенко, В. И. Прудникова, Т. В. Турчак, *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 5: 595 (2005).
13. Yu. G. Gordienko and E. E. Zasimchuk, *Philos. Mag. A*, **70**, No. 1: 99 (1994).

14. В. Е. Панин, В. Е. Егорушкин, Ю. А. Хон, Т. Ф. Елсукова, *Изв. вузов. Физика*, **24**, № 12: 5 (1982).
15. В. Е. Егорушкин, В. Е. Панин, Е. В. Савушкин, Ю. А. Хон, *Изв. вузов. Физика*, **30**, № 1: 9 (1987).
16. S. Flach and A. V. Gorbach, *Phys. Reports*, **467**: 1 (2008).
17. V. I. Dubinko, P. A. Selyshchev, and J. F. R. Archilla, *Phys. Rev. E*, **83**, No. 4: 041124 (2011).
18. O. Gatsenko, L. Bekenev, E. Pavlov, and Yu. G. Gordienko, *Comp. Sci.*, **14**, No. 1: 27 (2013).
19. P. Kacsuk, Z. Farkas, M. Kozlovsky, G. Hermann, A. Balasko, K. Karoczka, and I. Marton, *J. Grid Comp.*, **9**, No. 4: 479 (2012).
20. O. Baskova, O. Gatsenko, and Yu. G. Gordienko, *Proc. Cracow Grid Workshop'10 (2011, Cracow, Poland)*, p. 234.
21. Y. Gordienko, L. Bekenev, O. Baskova, O. Gatsenko, E. Zasimchuk, and S. Stirenko, *Proc. of 6<sup>th</sup> International Workshop on Science Gateways 'IWSG-2014' (2014, Dublin, Ireland)*, arXiv preprint arXiv:1404.5611.
22. S. Stirenko, O. Zinenko, and D. Gribenko, *Proc. Third Int. Conf. 'High Performance Computing HPC-UA 2013' (2013, Kyiv, Ukraine)*, p. 380.
23. S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, *Phys. Rev. B*, **33**, No. 12: 7983 (1986).
24. K. W. Jacobsen, J. K. Norskov, and M. J. Puska, *Phys. Rev. B*, **35**, No. 14: 7423 (1987).
25. S. Plimpton, *J. Comp. Phys.*, **117**: 1 (1995).
26. W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, *J. Mol. Graph.*, **14**, No. 1: 33 (1996).
27. A. Stukowski, *Mod. Sim. Mater. Sci. Eng.*, **18**, No. 1: 015012 (2010).
28. Ю. Г. Гордиенко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 9: 1217 (2011).
29. H. Tsuzuki, P. Branicio, and J. Rino, *Comp. Phys. Comm.*, **177**: 518 (2007).
30. E. E. Zasimchuk, Yu. G. Gordienko, J. Schreiber, R. Gontareva, P. Kuznetsov, and V. Karbovsky, *Mater. Sci. Forum*, **567**: 421 (2008).
31. Е. Э. Засимчук, И. Т. Ярматов, *Физическая мезомеханика*, **12**, № 3: 55 (2009).
32. Е. Э. Засимчук, Ю. Г. Гордиенко, А. С. Гаценко, А. И. Баскова, И. Т. Ярматов, *Физическая мезомеханика*, **13**, № 2: 61 (2010).
33. O. Gatsenko, O. Baskova, O. Lodygensky, G. Fedak, and Yu. G. Gordienko, *Key Eng. Mater.*, **465**: 306 (2011).
34. M. Wojdyr, Y. Mo, E. Grzanka, S. Stelmakh, S. Gierlotka, T. Proffen, and I. Szlufarska, *Z. Kristallogr.*, **26**, Suppl.: 255 (2007).
35. М. А. Кривоглаз, *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Киев: Наукова думка: 1988).

## REFERENCES

1. E. E. Zasimchuk and L. I. Markashova, *Mater. Sci. Eng. A*, **127**, No. 1: 33 (1990).
2. Yu. G. Gordienko, R. G. Gontareva, J. S. Schreiber, E. E. Zasimchuk, and I. K. Zasimchuk, *Adv. Eng. Mater.*, **8**, No. 10: 957 (2006).
3. E. E. Zasimchuk, Yu. G. Gordienko, R. G. Gontareva, and I. K. Zasimchuk, *J. Mater. Eng. Perf.*, **12**, Iss. 10: 69 (2003).
4. Yu. G. Gordienko, E. E. Zasimchuk, and R. G. Gontareva, *J. Mater. Sci. Lett.*, **22**, No. 3: 241 (2003).



5. Yu. G. Gordienko, E. E. Zasimchuk, R. Gontareva, and V. Alexandrov, *Int. J. Eng. Simul.*, **1**, No. 3: 2 (2000).
6. P. V. Kuznetsov, I. V. Petrakova, Y. G. Gordienko, E. E. Zasimchuk, and V. L. Karbovskii, *Phys. Mesomech.*, **12**, No. 1: 85 (2009).
7. E. E. Zasimchuk, Yu. G. Gordienko, L. Markashova, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Perf.*, **18**, Iss. 7: 947 (2009).
8. E. Zasimchuk, L. Markashova, O. Baskova, T. Turchak, N. Chausov, V. Hutsaylyuk, and V. Berezin, *J. Mater. Eng. Perf.*, **22**, Iss. 11: 3421 (2013).
9. E. E. Zasimchuk, L. I. Markashova, T. V. Turchak, N. G. Chausov et al., *Fizicheskaya Mezomekhanika*, **12**, No. 2: 77 (2009) (in Russian).
10. N. Chausov, E. Zasimchuk, L. Markashova, V. Vil'deman et al., *Tekhnicheskaya Diagnostika i Nerazrushayushchiiy Kontrol'*, **4**: 54 (2008) (in Russian).
11. E. Zasimchuk, Yu. Gordienko, L. Markashova, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Perf.*, **18**, Iss. 7: 947 (2009).
12. E. Eh. Zasimchuk, Yu. G. Gordienko, V. I. Prudnikova, and T. V. Turchak, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **27**, No. 5: 595 (2005) (in Russian).
13. Yu. G. Gordienko and E. E. Zasimchuk, *Philos. Mag. A*, **70**, No. 1: 99 (1994).
14. V. E. Panin, V. E. Egorushkin, Yu. A. Khon, and T. F. Elsukova, *Izv. Vuzov. Fizika*, **24**, No. 12: 5 (1982) (in Russian).
15. V. E. Egorushkin, V. E. Panin, E. V. Savushkin, and Yu. A. Khon, *Izv. Vuzov. Fizika*, **30**, No. 1: 9 (1987) (in Russian).
16. S. Flach and A. V. Gorbach, *Phys. Reports*, **467**: 1 (2008).
17. V. I. Dubinko, P. A. Selyshchev, and J. F. R. Archilla, *Phys. Rev. E*, **83**, No. 4: 041124 (2011).
18. O. Gatsenko, L. Bekenev, E. Pavlov, and Yu. G. Gordienko, *Comp. Sci.*, **14**, No. 1: 27 (2013).
19. P. Kacsuk, Z. Farkas, M. Kozlovsky, G. Hermann, A. Balasko, K. Karoczkai, and I. Marton, *J. Grid Comp.*, **9**, No. 4: 479 (2012).
20. O. Baskova, O. Gatsenko, and Yu. G. Gordienko, *Proc. Cracow Grid Workshop'10 (2011, Cracow, Poland)*, p. 234.
21. Y. Gordienko, L. Bekenev, O. Baskova, O. Gatsenko, E. Zasimchuk, and S. Stirenko, *Proc. of 6<sup>th</sup> International Workshop on Science Gateways 'IWSG-2014' (2014, Dublin, Ireland)*, arXiv preprint arXiv:1404.5611.
22. S. Stirenko, O. Zinenko, and D. Gribenko, *Proc. Third Int. Conf. 'High Performance Computing HPC-UA 2013' (2013, Kyiv, Ukraine)*, p. 380.
23. S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, *Phys. Rev. B*, **33**, No. 12: 7983 (1986).
24. K. W. Jacobsen, J. K. Norskov, and M. J. Puska, *Phys. Rev. B*, **35**, No. 14: 7423 (1987).
25. S. Plimpton, *J. Comp. Phys.*, **117**: 1 (1995).
26. W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, *J. Mol. Graph.*, **14**, No. 1: 33 (1996).
27. A. Stukowski, *Mod. Sim. Mater. Sci. Eng.*, **18**, No. 1: 015012 (2010).
28. Yu. G. Gordienko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, No. 9: 1217 (2011) (in Ukrainian).
29. H. Tsuzuki, P. Branicio, and J. Rino, *Comp. Phys. Comm.*, **177**: 518 (2007).
30. E. E. Zasimchuk, Yu. G. Gordienko, J. Schreiber, R. Gontareva, P. Kuznetsov, and V. Karbovsky, *Mater. Sci. Forum*, **567**: 421 (2008).
31. E. E. Zasimchuk and I. T. Yarmatov, *Fizicheskaya Mezomekhanika*, **12**, No. 3: 55 (2009) (in Russian).
32. E. E. Zasimchuk, Yu. G. Gordienko, A. S. Gatsenko, A. I. Baskova, and

- I. T. Yarmatov, *Fizicheskaya Mezomekhanika*, **13**, No. 2: 61 (2010) (in Russian).
33. O. Gatsenko, O. Baskova, O. Lodygensky, G. Fedak, and Yu. G. Gordienko, *Key Eng. Mater.*, **465**: 306 (2011).
34. M. Wojdyr, Y. Mo, E. Grzanka, S. Stelmakh, S. Gierlotka, T. Proffen, and I. Szlufarska, *Z. Kristallogr.*, **26**, Suppl.: 255 (2007).
35. M. A. Krivoglaz, *Difraktsiya Rentgenovskikh Luchey i Neytronov v Neideal'nykh Kristallakh* (Kiev: Naukova Dumka: 1988) (in Russian).