

ATOMISTIČKO MODELIRANJE CIKLIČKOG OPTEREĆENJA MONOKRISTALA BAKRA

Trapić, I., Pezer R., Sorić J.

Sažetak: Metode mehanike kontinuuma ne pružaju uvid u nanostrukturu materijala na kojoj se temelje njegova mehanička svojstva. Prilikom deformiranja u kristalnoj strukturi materijala dolazi do generiranja oštećenja u obliku dislokacija koje su posljedica rekonfiguracije atoma u novi ravnotežni položaj. Uvid u nanostrukturu kristalne rešetke pruža molekularna mehanika.

Primjenom molekularne mehanike unutar programskog paketa *LAMMPS* modelirano je deformiranje monokristala bakra. Interakcija između atoma kristalne rešetke modelirana je primjenom realnog međuatomskog potencijala zasnovanog na metodi ugrađenih atoma ugođenoj za bakar. Razmatrani su slučajevi opterećenja konstantnom brzinom produljenja i harmonijskim vremenski promjenjivim produljenjem simulacijske ćelije. Smjer produljenja se u svim analiziranim slučajevima nalazi u istoj ravnini idealne rešetke dok je u smjeru okomitom na ravninu produljenja dopuštena promjena simulacijske ćelije uslijed anizotropnog odgovora monokristala.

Za nametnutu deformaciju sustava izračunato je ekvivalentno naprezanje i posmično naprezanje u ravnini smicanja kristalne rešetke. Posebna pažnja posvećena je broju i duljini dislokacija koje se generiraju unutar monokristala kao odziv nanostrukture na deformaciju. U rezultatima je prisutna promjena energije kristala što upućuje na oslabljivanje materijala. Pri cikličkom opterećenju primijećeno je smanjenje gustoće dislokacija nakon rasterećenja kristalne rešetke što upućuje na mogućnost oporavka nanostrukture.

Ključne riječi: Molekularna mehanika, Dislokacije, *LAMMPS*.

1 UVOD

Vlačni test najučestalija je vrsta pokusa kojim se utvrđuju mehanička svojstva metala kao što su granica tečenja i vlačna čvrstoća. Međutim klasičnim vlačnim testom mogućnost razumijevanja procesa koji se odvijaju u samom materijalu je ograničena. Nedostatak se očituje u složenosti dinamike dislokacija koja je određena stupnjevima slobode velikog broja atoma. Eksperimentom je potrebno obuhvatiti veliki raspon vremenskih i prostornih veličina od makro- do nanorazine što dodatno otežava interpretaciju rezultata. U posljednjih dvadeset godina razvitak računalne moći paralelno s razvojem sofisticiranih fizikalnih modela omogućio je provođenje numeričkih eksperimenata koji mogu nadopuniti informacije koje nam daje vlačni test.

2 DEFINICIJA PROBLEMA

Formiranje ispravne teorije dinamike dislokacija za potrebe modeliranja plastične deformacije u metalima iznimno je složeno. U proteklih pola stoljeća unatoč mnogim teoretskim pokušajima još uvijek nije osmišljena jedinstvena teorija fenomena dislokacija. Bilo je znatnog napretka u modeliranju inicijacije i rasta zamornih

pukotina uslijed višeosnih naprezanja kao što je Fatemi-Socie parametar [3] primijenjen za čelične uzorke. Međutim na atomskoj razini se pokazalo da važnu ulogu ima posmično naprezanje u ravnini smicanja [8] i [9].

U okviru ovoga rada molekularna mehanika je korištena za rasvjetljavanje kako glavna i posmična naprezanja utječu na iniciranje dislokacija u idealnoj plošno centriranoj kubičnoj (eng. **Face Centered Cubic**, FCC) kristalnoj rešetci bakra pri sobnoj temperaturi. Cilj je proučiti korelaciju između smjera deformacije kristalne rešetke, posmičnog naprezanja u {111} ravnini smicanja FCC kristalne rešetke i gustoće dislokacija unutar kristala. Fokus je postavljen na deformacijsku zonu popuštanja materijala kod koje dolazi do brzog porasta broja dislokacija.

3 SIMULACIJSKI MODEL I METODE

Numerički eksperimenti deformiranja monokristala bakra provedeni su pomoću programskog paketa LAMMPS (eng. **Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator**). LAMMPS sadržava brojne algoritme za formiranje i analizu atomskih modela što omogućava brzo i efikasno integriranje Newtonovih jednadžbi gibanja te analizu rezultata. Koordinatne osi x , y i z simulacijske ćelije paralelne su kristalografskim vektorima jedinične FCC ćelije. Periodični rubni uvjeti nametnuti su u smjeru x , y i z koordinatnih osi.

3.1 Metoda ugrađenih atoma

Interakcija između atoma kristalne rešetke modelirana je primjenom metode ugrađenih atoma (eng. **Embed Atom Method**, EAM). Primijenjeni realni potencijal u potpunosti određuje svojstva sustava i dinamiku generiranja oštećenja na nanorazini. U navedenoj metodi potencijalna energija sustava je funkcija položaja atoma u prostoru dok istovremeno upravlja interakcijom (preko međuatomskih sila) susjednih atoma. Metoda je vrlo pogodna za opisivanje metalne veze između atoma budući da je u mogućnosti obuhvatiti utjecaj zajedničkog elektronskog oblaka kristalne rešetke. Potencijal predložen od M. S. Dawna i M. I. Baskesa ([1] i [2]) temelji se na kvantnoj mehaničkoj teoriji gustoće funkcionala. U tom pristupu objedinjena su teoretska razmatranja s parametrima za ugađanje svojstva kristala. Potencijalna energija kristala je definirana izrazom koji slijedi:

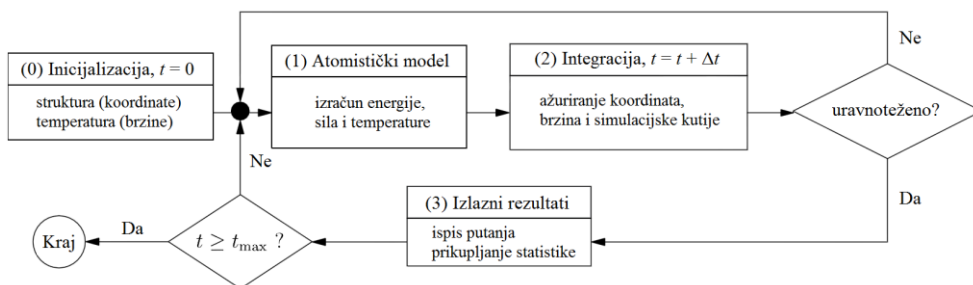
$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_{h,i}) \quad (1)$$

Prvi član izraza je odbojna interakcija po parovima atoma dok je drugi član višечestična privlačna interakcija kojom se modelira ugrađivanje pozitivne jezgre atoma u elektronski oblak okolnih atoma. Energija ugrađivanja opisana je poluempirijskim funkcionalom F_i u kojem indeks označava lokalnu gustoću elektronskog oblaka na mjestu atoma i . Pogodni EAM modeli ugođeni za bakar su dostupni [10] i u mogućnosti su dati uvid u neravnotežna stanja unutra kristala kao što su praznine i dislokacije.

3.2 Simulacijski model

Slika 1. prikazuje dijagram toka za vremensku analizu sustava primjenom molekularne mehanike. Vremenska integracija sustava provedena je primjenom Verletovog algoritma. Nakon zadavanja inicijalnog monokristala željene orijentacije sustav je

pušten da se relaksira 20 ps. U relaksaciji je nametnut izobarni-izotermni (NpT) ansambl pri čemu je tlak na svim površinama 0 Pa. Cilj relaksacije je eliminirati eventualna naprezanja koja bi se mogla javiti u početnoj kristalnoj rešetci.



Slika 1. Dijagram toka vremenske evolucije sustava konačne temperature u molekularnoj mehanici [7].

Nakon relaksacije kristal je deformiran. Relativno produljenje stranica simulacijske ćelije je nametnuto u smjeru osi x i y prema smjeru produljenja definiranom kutom ϕ . U smjeru osi z je NpT ansamblom postavljen tlak od 0 Pa uz mogućnost kontrakcije kristala u tom smjeru. U tablici 1 navedeni su parametri simulacijskog modela.

Tablica 1. Parametri simulacije

veličina simulacijske ćelije	prije relaksacije	9,025 nm
	nakon relaksacije	9,080 nm
temperatura sustava		300 K
broj atoma		62 500
vrijeme relaksacije		20 ps
vrijeme deformiranja		75 ps
amplituda relativnog produljenja $\Delta l_{rel,A}$		0,18
period harmonijskog relativnog produljenja t_p		25 ps
konstantna brzina relativnog produljenja		0,01 ps ⁻¹

Valja imati na umu da fizikalne veličine koje opažamo na atomskoj razini ne predstavljaju nužno laboratorijske mjerljive veličine. Izrazom (2) prikazano je formiranje Cauchyeva tenzora naprezanja simulacijske kutije [7]

$$\sigma_{ij} = \frac{-1}{V} \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{p_i^\alpha p_j^\alpha}{m^\alpha} + f_i^{unu,\alpha} r_j^\alpha \right). \quad (2)$$

Iz izraza je vidljivo da se naprezanje sastoji od dva dijela. Prvi „kinetički“ dio je vezan za količinu gibanja atoma dok je drugi „potencijalni“ član i vezan za unutarnje sile na atome sustava. Znakom sume obuhvaćen je utjecaj svih atoma unutar simulacijske ćelije.

3.3 Način opterećenja

Za utvrđivanje odziva nanostrukture na kristalnu rešetku nametnuta su dva slučaja vlačne deformacije: produljenje stranica simulacijske ćelije konstantnom brzinom i harmonijsko produljenje. Amplituda harmonijskog relativnog produljenja odabrana je tako da materijal uđe u plastičnost kako bi se mogla ostvariti dovoljna gustoća

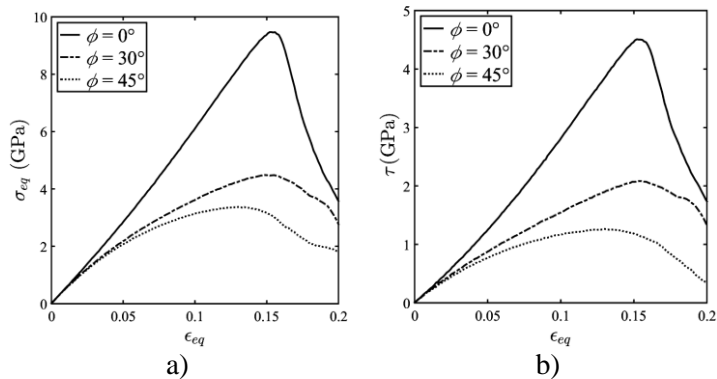
dislokacija. Dodatno je proučen i utjecaj različitih smjerova deformacije zadanih parametrom ϕ koji opisuje kut između smjera relativnog produljenja i osi x . Za konstantnu brzinu relativnog produljenja odabrana je vrijednost $\partial\Delta l_{rel}/\partial t$ od $0,01 \text{ ps}^{-1}$. Primijenjeno harmonijsko relativno produljenje izraženo je jednadžbama:

$$\Delta l_{rel,x} = \frac{\Delta l_{rel,A} \cdot \cos(\phi)}{2} \left[1 + \sin\left(\frac{2\pi}{t_p} \cdot t - \frac{\pi}{2}\right) \right], \quad (3)$$

$$\Delta l_{rel,x} = \frac{\Delta l_{rel,A} \cdot \sin(\phi)}{2} \left[1 + \sin\left(\frac{2\pi}{t_p} \cdot t - \frac{\pi}{2}\right) \right]. \quad (4)$$

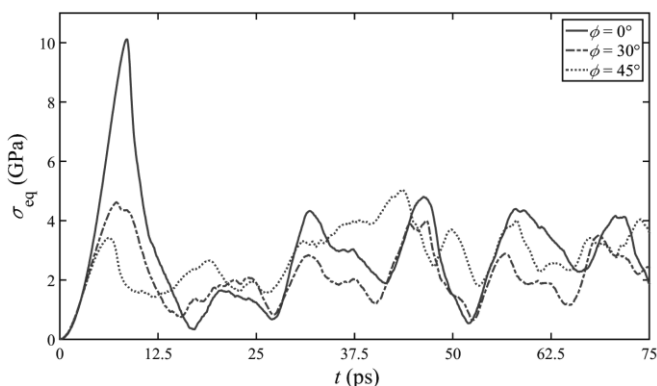
4 REZULTATI

Slika 2. prikazuje dijagrame ekvivalentnog napreznja i posmičnog napreznja u ravni smicanja FCC kristalne rešetke za slučaj opterećenja konstantnom brzinom relativnog produljenja. Dijagram jasno pokazuje ovisnost napreznja o smjeru produljenja. S povećanjem deformacije nakon početnog elastičnog odziva započinje generiranje dislokacija i dolazi do karakterističnog pada napreznja i ulaska u područje plastične deformacije što kvalitativno odgovara rezultatima standardnog vlačnog testa. Osim iznosa maksimalnog ekvivalentnog napreznja koje se javlja unutar kristala može se primijetiti i da krivulja poprima položajni izgled uz znatno manje izraženo tjeme maksimalnog napreznja.



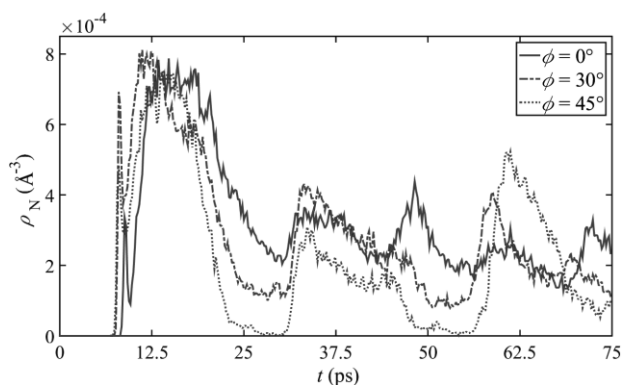
Slika 2. Dijagrami napreznja-deformacija za različite smjerove deformacije. Brzina relativnog produljenja je $0,01 \text{ ps}^{-1}$, a) ekvivalentna napreznja, b) posmično napreznje u ravni smicanja $\{111\}$ FCC kristalne rešetke.

Slika 3. prikazuje raspodjelu ekvivalentnog napreznja pri cikličkom opterećenju. Kao i u slučaju konstantne brzine relativnog produljenja analizirani su različiti smjerovi produljenja. Iz dijagrama je vidljivo da monokristal bakra ima tendenciju gubitka sinkronog odziva napreznja na produljenje. Posmično napreznje u ravni smicanja je pod utjecajem normalnih komponenti napreznja koje se javljaju u kristalu kao što je pokazano u [4] što ukazuje da postoji još utjecajnih faktora osim Schmidtova zakona koji utječu na iniciranje dislokacija.



Slika 3. Ekvivalentno naprezanje pri cikličkom opterećenju za različite smjerove produljenja.

U svrhu dobivanja jasnijeg uvida u iniciranje dislokacija provedena je identifikacija dislokacija unutar razmatranog sustava upotrebom proširenog DXA (eng. **D**islocation **E**xtraction **A**lgorithm, DXA) algoritma [5] i [6]. Na slici 3 prikazana je gustoća dislokacija unutar kristala. Iz dijagrama je vidljivo da se najveći broj dislokacija generira prilikom postizanja maksimalnog naprezanja.



Slika 3. Gustoća dislokacija prilikom cikličkog opterećenja.

Nakon prelaska u plastično područje paralelno sa smanjenjem naprezanja u sustavu dolazi do pada gustoće, odnosno broja dislokacija, što upućuje na rekonfiguraciju same nanostrukture i popuštanje materijala. Razmatranjem morfologije dislokacija vidljivo je da je većina dislokacija tipa Shockleyeve parcijalne dislokacije što je konzistentno s greškama slaganja. Energija greške slaganja u FCC kristalnim strukturama obično je povezana sa slabijom mobilnosti dislokacija unutar kristala stoga je veći broj parcijalnih umjesto cjelovitih dislokacija. Za bakar energija greške slaganja iznosi 70-80 mJ/m².

3 ZAKLJUČAK

U ovom radu su metodama molekularne mehanike, primjenom programskog paketa LAMMPS, provedeni numerički eksperimenti višeosnog monotonog i harmonijskog deformiranja monokristala bakra pri sobnoj temperaturi. Proučeno je naprezanje i

dinamika iniciranja dislokacija unutar kristala. Primijećen je različit odziv monokristala ovisno o smjeru deformacije.

Pretpostavljamo da nije vjerojatan razvoj jedinstvenog modela iniciranja dislokacija primjenjivog za sve metalne sustave neovisno o načinu opterećenja zbog pokazane složenost fizikalnih svojstva na atomskoj razini za slučaj višeosnog harmoničnog opterećenja.

Financijska potpora

Ovaj rad je financirala Hrvatska zaklada za znanost projektom „Multiscale Numerical Modeling of Material Deformation Responses from Macro- to Nanolevel“ (2516).

Literatura:

- [1] Daw M. S., Baskes M. I.: *Emdedded-atom method - derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals*, Phy. Rev. vol 29, no. 12, pp. 6443-6453, 1984., doi: 10.1103/PhysRevB.29.6443
- [2] Daw M. S., Foiles S. M., Baskes M. I.: *The embedded-atom method - a review of theory and Applications*, Mater.Sci.Rep. 9, pp. 251., 1993., doi: 10.1016/0920-2307(93)90001-U
- [3] Fatemi, A., Socie, D.: *A critical plane approach to multiaxial fatigue damage including out-of-phase loading*, Fatigue Fracture Eng. Mater. Struct. 11, 149–165., 1988., doi: 10.1111/j.1460-2695.1988.tb01169.x
- [4] Ogata, S., Ju, L., Yip, S.: *Ideal pure shear strength of aluminium and copper*, Science 298 (5594), 807–811., 2002., doi: 10.1126/science.1076652
- [5] Stukowski, A.: *A triangulation-based method to identify dislocations in atomistic models*, J. Mech. Phys. Solids 70, 314-319., 2014., doi: 10.1016/j.jmps.2014.06.009
- [6] Stukowski, A., Bulatov, V. V., Arsenlis, A.: *Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces*, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 20 (2012) 085007 (16pp), DOI: 10.1088/0965-0393/20/8/085007
- [7] Tadmor, E. B., Miller, R. E.: *Modeling Materials*, Cambridge University Press, 2011
- [8] Tschopp, M.A., McDowell, D.L.: *Influence of single crystal orientation on homogeneous dislocation nucleation under uniaxial loading*, J Mech Phys Solids, 56 1806-1830., 2008., doi: 10.1016/j.jmps.2007.11.012
- [9] Wan L, Li J: *Shear responses of [(1)over-bar 1 0]-tilt {115}/{111} asymmetric tilt grain boundaries in fcc metals by atomistic simulations*, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 21 055013, 2013, doi: 10.1088/0965-0393/21/5/055013
- [10] Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, and J.D. Kress: *Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations*, Phys. Rev. B, 63, 224106, 2001. doi: 10.1103/PhysRevB.63.224106.

Autori:

Ivan Trapić, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zavod za tehničku mehaniku, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, tel. 01/6168-178, fax. 01/6168-178, e-mail: ivan.trapic@fsb.hr, web: <http://www.fsb.hr/lnm/staff/>

Robert Pezer. Sveučilište u Zagrebu, Metalurški fakultet, Aleja narodnih heroja 3, 44103 Sisak, e-mail: rpezer@simet.hr, web: <https://www.simet.unizg.hr/o-fakultetu/Members/rpezer>

Jurica Sorić, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zavod za tehničku mehaniku, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, tel. 01/6168-103, fax. 01/6168-187, e-mail: jurica.soric@fsb.hr, web: <http://www.fsb.hr/lnm/staff/>