

# KŘEHCE–TVÁRNÉ CHOVÁNÍ KRYSTALU ŽELEZA A SYSTÉMU Fe–Cu S TRHLINOU

V. Pelikán, P. Hora, O. Červená, A. Spielmannová, A. Machová,  
Ústav termomechaniky AV ČR, v.v.i.

Příspěvek vznikl na základě podpory projektu GA ČR č. 101/07/0789  
a záměru ÚT AV ČR, v.v.i., AV0Z20760514.

Všechny výpočty byly prováděny na klastrech MetaCentra za podpory  
výzkumného záměru MSM6383917201.

## Úvod

Molekulární dynamika:

- cenný nástroj pro materiálový výzkum,
- poskytuje informace o mikromechanice a kinetice poruch v materiálu, které nejsou dostupné z experimentů.

Experimenty v modelech Fe–Cu prokázaly:

- existenci bcc Cu nano–částic,
- vznik nano–dutin, jejichž vnitřní prostor je pokrytý atomy Cu.

## Úvod

Molekulární dynamika:

- cenný nástroj pro materiálový výzkum,
- poskytuje informace o mikromechanice a kinetice poruch v materiálu, které nejsou dostupné z experimentů.

Experimenty v modelech Fe–Cu prokázaly:

- existenci bcc Cu nano–částic,
- vznik nano–dutin, jejichž vnitřní prostor je pokrytý atomy Cu.

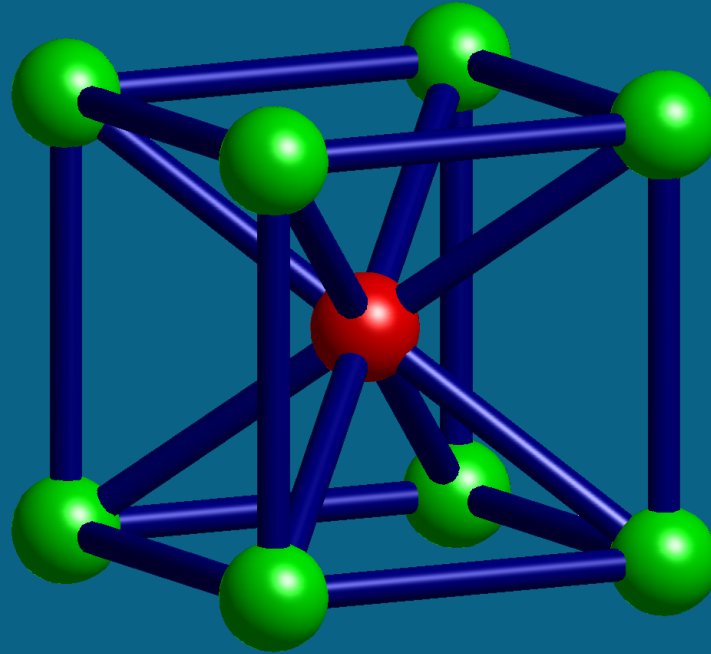
Jaký vliv mají atomy mědi na křehce tvárné chování  
v čele trhliny ve srovnání s čistým bcc krystalem železa?



Studium mechanických odezev otupené trhliny  
pokryté či nepokryté atomy mědi.

## Popis problému

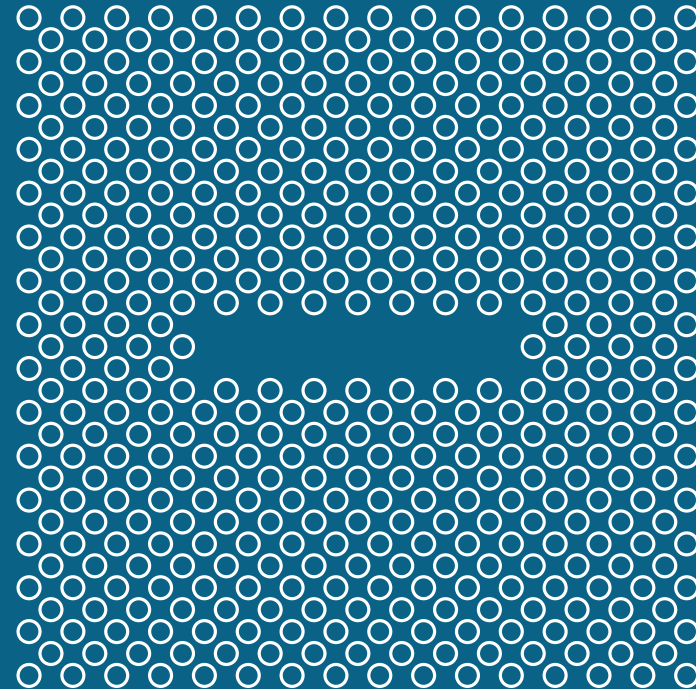
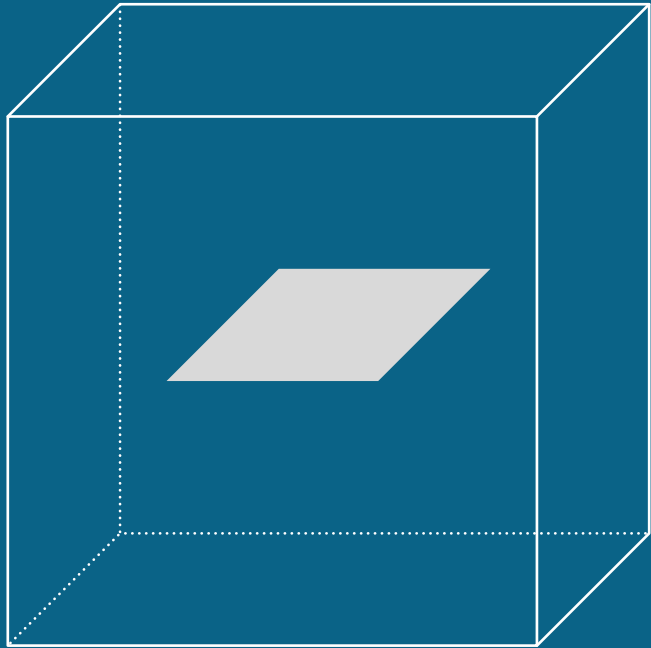
## bcc krystal železa



Krystal bcc železa má základní kubickou orientaci  $\{100\}$ .

- 1999 rovin ve směru možného rozšíření trhliny  $x = [100]$ ,
  - 99 rovin podél čela trhliny ve směru  $y = [010]$ ,
  - 1999 rovin ve směru zatížení  $z = [001]$
- $\Rightarrow \approx 100$  miliónů atomů.

## Popis trhliny

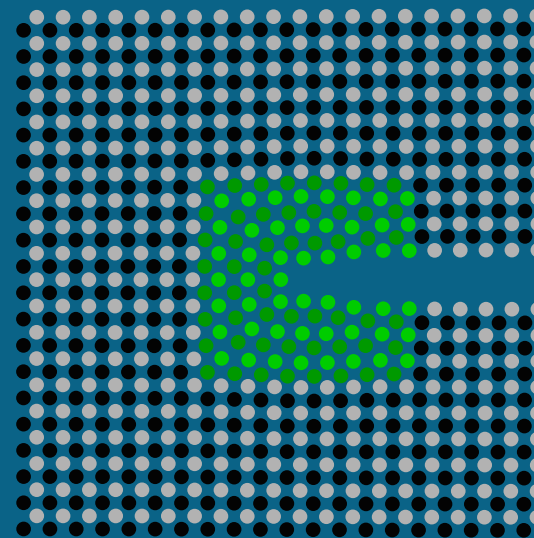
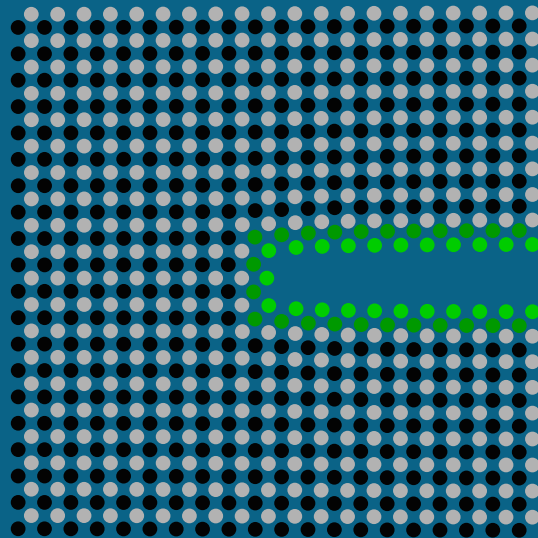
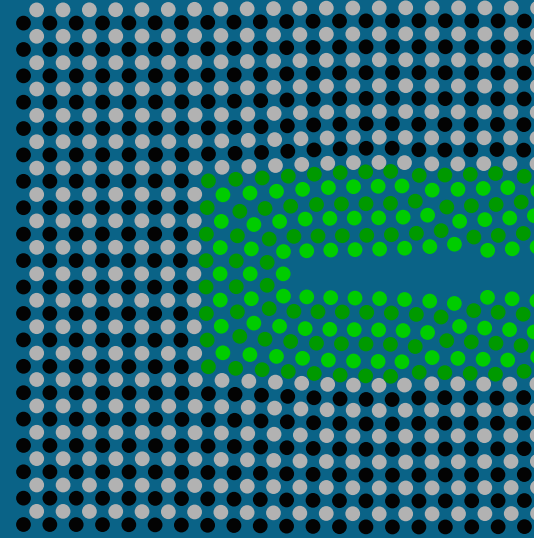
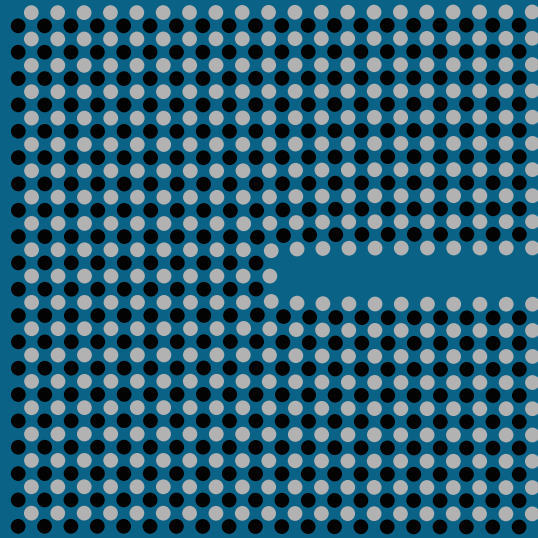


Centrální průchozí Griffithova trhlina  
je umístěna ve středu krystalu.

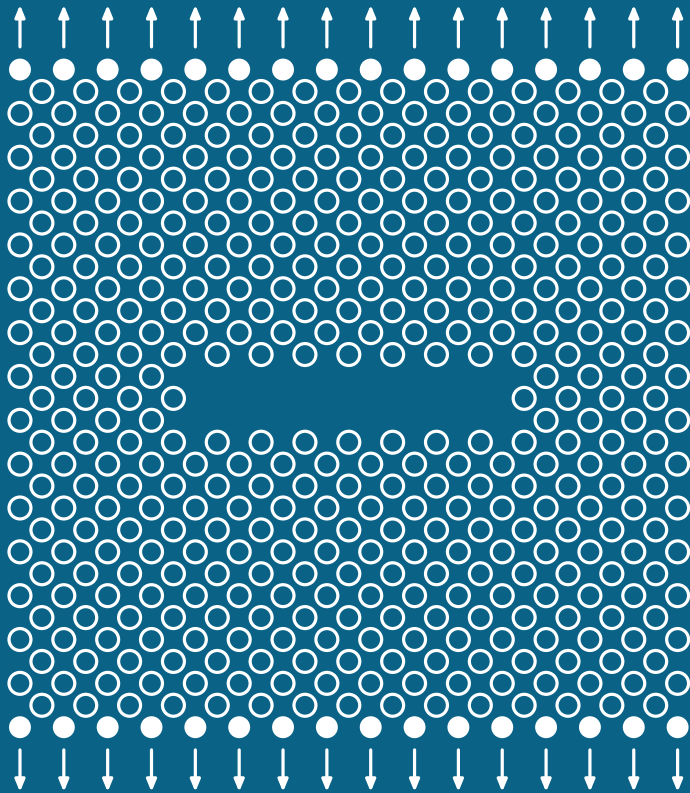
Počáteční otupení odpovídá  $2 a_0$ .

Polovina délky trhliny  $l_0 = 100 a_0$ .

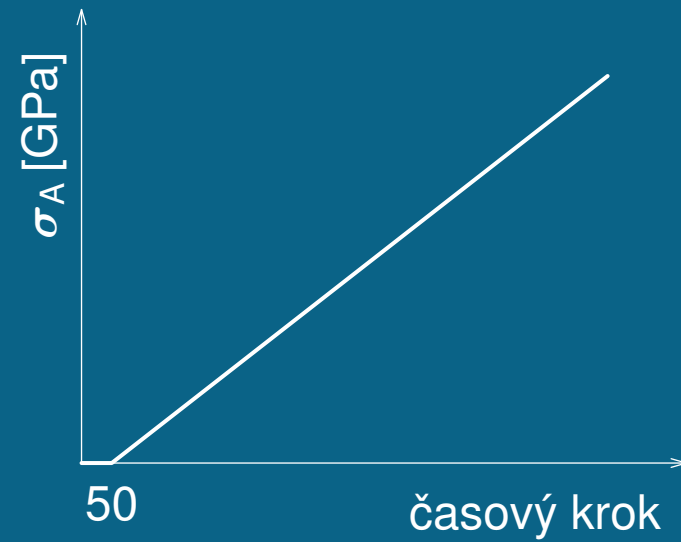
## Rozložení atomů mědi



## Typ zatěžování



Zatěžovací mód I



Rychlost zatěžování: 0,014 GPa/ps



## Vícečásticový potenciál

G.J.Ackland, D.J.Bacon, A.F.Calder, T.Harry:  
 Computer simulation of point defect properties in dilute Fe-Cu alloy  
 using a many-body interatomic potential.  
 Philosophical Magazine A, 1997, Vol. 75, No. 3, 713–732

Energie souboru  $N$  atomů je dána výrazem

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V(r_{ij}) - \sum_{i=1}^N \left( \sum_{j \neq i=1}^N \phi(r_{ij}) \right)^{1/2}$$

$V(r_{ij})$  – repulzivní potenciál

$\phi(r_{ij})$  – kohezivní potenciál

## Postup simulace

- tvorba krystalu s trhlinou,
- fixace,
- povrchová relaxace,
- odstranění fixace,
- zatěžování.

---

Newtonovy pohybové rovnice jsou řešeny  
metodou centrálních diferencí.

Časový integrační krok:

$$1 \times 10^{-14} \text{ s}$$

## Simulační technika

- Simulační kód byl naprogramován ve *Fortranu 90*.
- Paralelní úloha, krystal rozřezán na 32 vrstev.
- Paralelizace využívala systému MPI (Message Passing Interface).

Používané funkce MPI:

- MPI\_INIT, MPI\_FINALIZE,
- MPI\_COMM\_RANK, MPI\_COMM\_SIZE,
- MPI\_SEND, MPI\_RECV, MPI\_BCAST,
- MPI\_ISSEND, MPI\_Irecv,
- MPI\_WAIT.

- Hash: metoda buňkových indexů (cell index method)

M.P.Allen, D.J.Tildesley: *Computer Simulation of Liquids*.  
Oxford University Press, New York, 1987

D. Frenkel, B. Smit: *Understanding Molecular Simulations*.  
Academic Press, New York, 1996

- Požadavky na paměť:

$$6 \times 8 + 2 \times 8 = 64 \text{ bytů/atom} \rightarrow 6 \text{ GB (4 uzlů 2 GB RAM)}$$

- Požadavky na diskový prostor:

$$6 \times 8 = 48 \text{ bytů/atom} \rightarrow 4,5 \text{ GB}$$

- 4 uzly klastru Skirit v Brně

procesor 2x Dual Core Xeon 5160 3 GHz, 4 MB cache,  
4 GB RAM, 73 GB HD, 1 Gbps Ethernet, Infiniband

V rámci každého uzlu bylo vždy spuštěno osm paralelních procesů.

Doba výpočtu jednoho časového kroku se pohybovala kolem 40 sekund.

## Poznámky k výsledkům

- zobrazeny na rovině (010), kolmo na čelo trhliny,
- zobrazeny pouze detaily levého rohu trhliny,
- provedena 3D "block like shear" (BLS) simulace bcc krystalu železa.

---

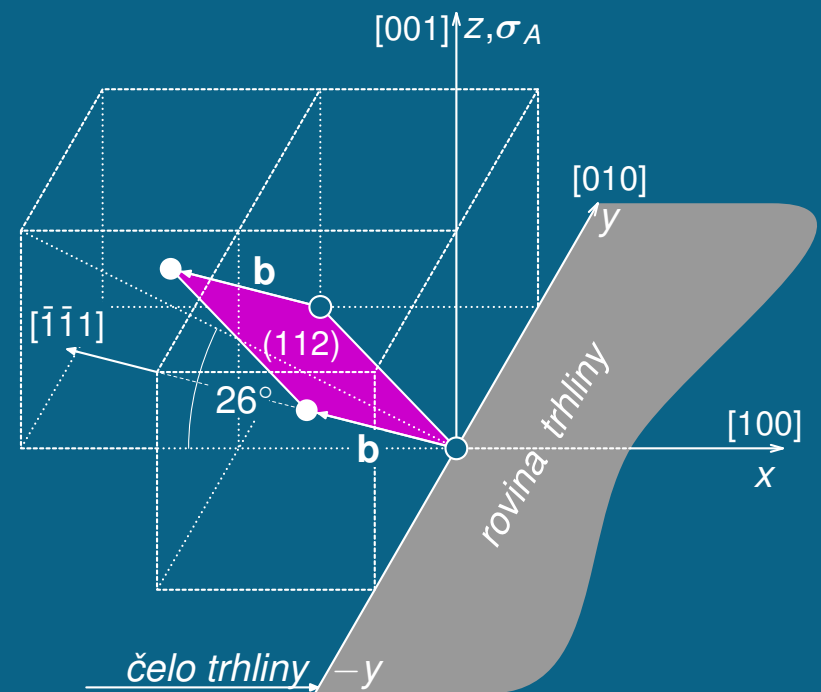
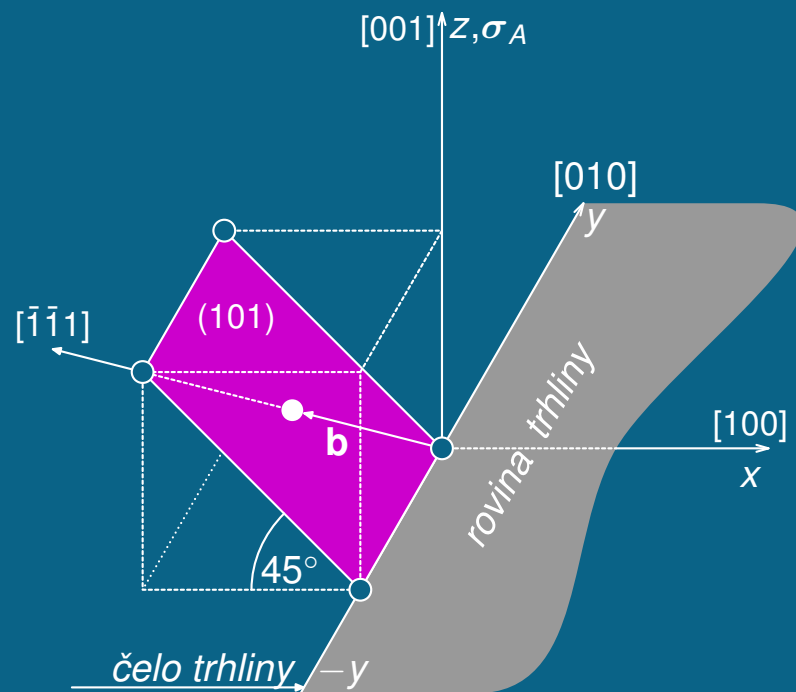
Vliv odrazu napěťových vln

## Otupená trhlina v čistém bcc železe

V časovém kroku 24 000  $\rightarrow \sigma_A = 3.36$  GPa:

- volný povrch vzorku
- emise dislokací na rovinách  $\{101\}$
- nesymetrie

Skluzový vzor na rovinách  $\langle 111 \rangle \{112\}$  nebyl až do konce simulace pozorován.



## Otupená trhlina pokrytá silnou vrstvou atomů Cu

V časovém kroku 19 200  $\rightarrow \sigma_A = 2.687$  GPa:

Malý ohyb trhliny uprostřed vzorku pravděpodobně po emisi dislokací od horního povrchu trhliny na rovinách  $\langle 111 \rangle \{101\}$ .

V časech 19 600 – 19 700:

Emise dislokací na rovinách  $\langle 111 \rangle \{101\}$  začíná na povrchu vzorku.

Trhlina pokrytá silnou vrstvou Cu je narozdíl od trhliny v čistém bcc železe méně stabilní.

V čase 24 500  $\rightarrow \sigma_A = 3.43$  GPa:

V porovnání s bcc železem je atomová struktura před čelem trhliny v systému Fe–Cu více poškozena a je detekován nesymetrický ohyb trhliny.

## Otupená trhlina pokrytá tenkou vrstvou atomů Cu

Volný povrch vzorku:

- časový krok 19 800  $\rightarrow \sigma_A = 2.772$  GPa
- emise dislokací na rovinách  $\{101\}$
- v čistém železe nebylo detekováno

V časovém kroku 20 900  $\rightarrow \sigma_A = 2.925$  GPa:

- na povrchu symetrický skluzový vzor od emise dislokací na rovinách  $\{101\}$ , což vede k otupení a stabilizaci trhliny
- uprostřed vzorku skluzový vzor od skluzu dislokací na rovinách  $\{112\}$ , což vytváří prázdné pozice atomů před čelem trhliny (nahore)

V časovém kroku 24 500  $\rightarrow \sigma_A = 3.43$  GPa:

Struktura okolo trhliny je více poškozená po plastické deformaci obou skluzových systémů, ale trhlina je stabilní (podobě jako u bcc železa).



## Otupená trhlina s nano-inkluzí Cu podél čela trhliny

Volný povrch vzorku:

- časový krok 22 900  $\rightarrow \sigma_A = 3.206$  GPa, což je menší než  $\sigma_A$  potřebné pro emisi dislokací v čistém železe
- emise dislokací na rovinách  $\{101\}$

Střed vzorku:

- časový krok 22 400  $\rightarrow \sigma_A = 3.136$  GPa
- možný ohyb trhliny
- časový krok 24 500  $\rightarrow \sigma_A = 3.43$  GPa
- zřetelný i šikmý skluzový systém  $\langle 111 \rangle \{112\}$

## Závěr

- MD simulace ukázaly, že otupená trhlina  $(001)[010]$  v čistém bcc železe při teplotě 0 K je po emisi dislokací v skluzových systémech  $\langle 111 \rangle \{101\}$  stabilní.
- Po plastické deformaci je pozorován malý ohyb trhliny uprostřed krystalu.
- Toto tvárné chování je odlišné od našich předchozích 3D simulací s úzkou trhlinou, kdy byla pozorována křehká iniciace trhliny.
- Křehce–tvárného přechodu může být dosaženo v bcc železe při 0 K také počátečním otupením trhliny.
- Výsledky ukazují, že emise dislokací je snažší v systémech Fe–Cu, poněvadž energie potřebná k emisi dislokací v bcc mědi je nižší než u bcc železa.
- Narozdíl od bcc železa byly skluzové procesy pozorovány jak na rovinách  $\{101\}$ , tak na rovinách  $\{112\}$ .
- Stabilita otupených trhlin v systémech Fe–Cu je v oblastech s mědí slabší než v čistém bcc železe (vzhledem k metastabilnímu charakteru bcc mědi).
- Výsledky jsou v kvalitativní shodě s našimi předchozími MD simulacemi, kde byly vyšetřovány interakce Cu nano-částic s ostrými trhlinami v krystalech železa.

## OBSAH

Úvod

Popis problému

bcc krystal železa

Popis trhliny

Rozložení atomů mědi

Typ zatěžování

Vícečásticový potenciál

Postup simulace

Simulační technika

Výsledky:

bcc železo

Silná vrstva Cu

Tenká vrstva Cu

Inkluze Cu

Závěr