

Received: 31.10.2024
Revised: 26.11.2024
Accepted: 06.12.2024
DOI: 10.17804/2410-9908.2024.6.119-130

THE BAIN AND ORTHORHOMBIC PATHS OF STRUCTURAL-PHASE TRANSFORMATIONS IN A TRANSITION METAL (V)

A. R. Kuznetsov^{a,*} and S. A. Starikov^b

*M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
18 S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620137, Russia*

^a  <https://orcid.org/0000-0002-4490-0727>  a_kuznetsov@imp.uran.ru;
^b  <https://orcid.org/0000-0002-5787-7407>  1.618034sergey@gmail.com

*Corresponding author. Email: a_kuznetsov@imp.uran.ru
Address for correspondence: ul. S. Kovalevskoy, 18, Ekaterinburg, 620108, Russia
Tel.: +7 (343) 374-4214; Fax: +7 (343) 374-5244

The energy of the Bain and orthorhombic paths of structural-phase transformations in a transition metal (V) under uniaxial deformation is studied by the ab-initio method. The orthorhombic path of transformation is refined in view of its symmetry. The softest branches of the phonon spectrum for the Bain path, responsible for the loss of structure stability, are found from the calculation of the phonon spectrum as a function of strain. The nature of the loss of stability is revealed, and the strain at which stability is lost under both tension and compression is evaluated. The most probable mechanisms determining the structure stability and the theoretical strength of the transition metal V are discussed. The results can relate to experimental situations of the deformation of small, defect-free regions, for example, in nanostructured materials, when surface layers are modified by plastic deformation, during nanoindentation, and during ultra-high plasticity of V-based alloys.

Keywords: ab-initio calculation, Bain and orthorhombic paths, phonon spectrum, structure stability

Acknowledgment

The work was performed under the state assignment from the Russian Ministry of Science and Higher Education (theme Structure, No 122021000033-2). The Uran supercomputer, IMM UB RAS, was used for the calculations.

References

1. Bain, E.C. The Nature of martensite. *Trans. AIME*, 1924, 70, 25–35.
2. Okatov, S.V., Kuznetsov, A.R., Gornostyrev, Yu.N., Urtsev, N.V., and Katsnelson, M.I. Effect of magnetic state on the α - γ transition in iron: first-principles calculations of the Bain transformation path. *Physical Review B*, 2009, 79 (9), 094111–094115. DOI: 10.1103/RevModPhys.84.945.
3. Grimvall, G., Magyari-Kope, B., Ozolins, V., and Persson, K.A. Lattice instabilities in metallic elements. *Review of Modern Physics*, 2012, 84 (3), 945–986. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.094111.
4. Kuznetsov, A.R., Starikov, S.A., and Sagaradze, V.V. Phonon instabilities in a metal on the Bain fcc–bcc transformation path. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2022, 6, 86–94. DOI: 10.17804/2410-9908.2022.6.086-094. Available at: http://dream-journal.org/issues/2022-6/2022-6_385.html
5. Kuznetsov, A.R. and Starikov, S.A. The Bain and orthorhombic paths of the bcc–fcc transformation in a bcc metal. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*,

- 2023, 6, 35–44. DOI: 10.17804/2410-9908.2023.6.035-044. Available at: http://dream-journal.org/issues/2023-6/2023-6_423.html
6. Clatterbuck, D.M., Krenn, C.R., Cohen, M.L., and Morris, J.W., Jr. Phonon instabilities and the ideal strength of aluminum. *Physical Review Letters*, 2003, 91 (13), 135501–135504. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.135501.
 7. Pokluda, J., Cern, M., Sandera, P., and Sob, M. Calculations of theoretical strength: state of the art and history. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 2004, 11, 1–28. DOI: 10.1007/s10820-004-4567-2.
 8. Pokluda, J., Černý, M., Šob, M., and Umeno, Y. Ab initio calculations of mechanical properties: methods and applications. *Progress in Materials Science*, 2015, 73, 127–158. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2015.04.001.
 9. Li, J. and Yip, S. Atomistic measures of materials strength. *CMES-Computer Modeling in Engineering and Science*, 2002, 3, 219. DOI: 10.3970/cmesc.2002.003.219.
 10. Nagasako, N., Jahnátek, M., Asahi, R., and Hafner, J. Anomalies in the response of V, Nb, and Ta to tensile and shear loading: ab initio density functional theory calculations. *Physical Review B*, 2010, 81, 094108–094121. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.094108.
 11. Landa, A., Söderlind, P., Naumov, I.I., Klepeis, J.E., and Vitos, L. Kohn anomaly and phase stability in group VB transition metals. *Computation*, 2018, 6, 29. DOI: 10.3390/computation6020029.
 12. Gouldstone, A., Koh, H.J., Zeng, K.Y., Giannakopoulos, A.E., and Suresh, S. Discrete and continuous deformation during nanoindentation of thin films. *Acta Materialia*, 2000, 48 (9), 2277–2295. DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00009-4.
 13. De la Fuente, O.R., Zimmerman, J.A., Gonzales, M., De la Figuera, A.J., Hamilton, J.C., Pai, W.W., and Rojo, J.M. Dislocation emission around nanoindentations on a (001) fcc metal surface studied by scanning tunneling microscopy and atomic simulation. *Physical Review Letters*, 2002, 88 (3), 036101–036104. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.036101.
 14. *Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures*, NATO Science Series E, L.L. Chang and K. Ploog, eds., Springer, Dordrecht, 728 p. DOI: 10.1007/978-94-009-5073-3.
 15. Tyumentsev, A.N., Ditenberg, I.A., Tsverova, A.S., Chernov, V.M., Potapenko, M.M., and Drobyshev, V.A. Regularities of V–4Ti–4Cr alloy microstructure formation in conditions of ultrahigh technological plasticity. *Voprosy Atomnoy Nauki i Tekhniki. Ser. Termoyadernyi Sintez*, 2018, 41 (4), 48–64. (In Russian). DOI: 10.21517/0202-3822-2018-41-4-48-64.
 16. Tyumentsev, A.N., Korotaev, A.D., Ditenberg, I.A., Pinzhin, Yu.P., and Chernov, V.M. *Zakonomernosti plasticheskoy deformatsii v vvysokoprochnykh i nanokristallicheskiykh metallicheskikh materiaakh* [Plastic Deformation of High-Strength Metallic Materials]. SO RAN Publ., Novosibirsk, 256 p. (In Russian).
 17. Tyumentsev, A.N., Litovchenko, I.Yu., Ditenberg, I.A., Pinzhin, Yu.P., Grinyaev, K.V., Smirnov, I.V., and Chernov, V.M. *Plasticheskaya deformatsiya v usloviyakh fazovoy nestabilnosti* [Plastic Deformation Under the Phase Instability of the Crystal Lattice]. NTL Publ., Tomsk, 2024, 212 p. (In Russian).
 18. Kimminau, G., Erhart, P., Bringa, E.M., Remington, B., and Wark, J.S. Phonon instabilities in uniaxially compressed fcc metals as seen in molecular dynamics simulations. *Physical Review B*, 2010, 81, 092102. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.092102.
 19. Colella, R. and Batterman, B.W. X-ray determination of phonon dispersion in vanadium. *Physical Review B*, 1970, 1, 3913. DOI: 10.1103/PhysRevB.1.3913.
 20. Savrasov, S.Y. and Savrasov, D.Y. Electron-phonon interactions and related physical properties of metals from linear-response theory. *Physical Review B*, 1996, 54, 16487. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.16487.
 21. Li, X., Schonecker, S., Zhao, J., Johansson, B., and Vitos, L. Ideal strength of random alloys from first principles. *Physical Review B*, 2013, 87, 214203. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.214203.

22. Suzuki, N. and Otani, M. The role of the phonon anomaly in the superconductivity of vanadium and selenium under high pressures. *Journal Physics: Condensed Matter*, 2007, 19, 125206. DOI: 10.1088/0953-8984/19/12/125206.
23. Černý, M. and Pokluda, J. Influence of superimposed biaxial stress on the tensile strength of perfect crystals from first principles. *Physical Review B*, 2007, 76, 024115. DOI: 10.1103/PhysRevB.76.024115.
24. Bolef, D.I., Smith, R.E., and Miller, J.G. Elastic properties of vanadium. I. Temperature dependence of the elastic constants and the thermal expansion. *Physical Review B*, 1971, 3, 4100. DOI: 10.1103/PhysRevB.3.4100.
25. Takemura, K. High-pressure X-ray study of Zn with a helium pressure medium. In: *Proceedings of the International Conference on High Pressure Science and Technology (AIRAPT-17)*, Honolulu, Hawaii, July 25–30, 1999, eds., M.H. Manghnani, W.J. Nellis, and M.F. Nicol, Universities Press, Hyderabad, India, 2000, vol. 1, pp. 440–442.
26. Koči, L., Ma, Y., Oganov, A.R., Souvatzis, P., and Ahuja, R. Elasticity of the superconducting metals V, Nb, Ta, Mo, and W at high pressure. *Physical Review B*, 2008, 77, 214101. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.214101.
27. Söderlind P., Eriksson O., Wills J.M., and Boring A.M. Theory of elastic constants of cubic transition metals and alloys. *Physical Review B*, 1993, 48, 5844. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.5844.
28. Katahara, K.W., Manghnani, M.H., and Fisher, E. Elastic moduli of paramagnetic chromium and Ti-V-Cr alloys. *Journal of Physics F: Metal. Physics*, 1979, 9, 773. DOI: 10.1088/0305-4608/9/11/008.
29. Kittel, C. *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York, 1996, 674 p.
30. Luo, W., Roundy, D., Cohen, M.L., and Morris Jr., J.W. Ideal strength of bcc molybdenum and niobium. *Physical Review B*, 2002, 66, 094110. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.094110.

Подана в журнал: 31.10.2024

УДК 538.913:534-16

DOI: 10.17804/2410-9908.2024.6.119-130

БЕЙНОВСКИЙ И ОРТОРОМБИЧЕСКИЙ ПУТИ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ПЕРЕХОДНОМ МЕТАЛЛЕ (ВАНАДИИ)

А. Р. Кузнецов^{a,*}, С. А. Стариков^b

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,
ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620137, Россия*

^a  <https://orcid.org/0000-0002-4490-0727>  a_kuznetsov@imp.uran.ru;

^b  <https://orcid.org/0000-0002-5787-7407>  1.618034sergey@gmail.com

*Ответственный автор. Электронная почта: a_kuznetsov@imp.uran.ru
Адрес для переписки: ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620108, Россия
Тел.: +7 (343) 374-42-14; факс: +7 (343) 374-52-44

Первопринципным методом изучена энергетика бейновского и орторомбического путей структурно-фазовых превращений при одноосной деформации переходного металла (ванадия). Уточнен орторомбический путь превращения с учетом его симметрии. В результате расчета фононного спектра в зависимости от деформации найдены наиболее мягкие ветви фононного спектра для бейновского пути, ответственные за потерю устойчивости структуры. Выявлен характер потери устойчивости, а также оценена величина деформации, при которой теряется устойчивость как при растяжении, так и при сжатии. Отмечены наиболее вероятные механизмы, определяющие устойчивость структуры и теоретическую прочность переходного металла V. Результаты могут относиться к ситуациям в эксперименте, когда деформируются малые, свободные от дефектов области, например, в наноструктурированных материалах при модифицировании поверхностных слоев пластическим деформированием, при наноиндентировании, при сверхвысокой пластичности сплавов на основе V.

Ключевые слова: первопринципный расчет, бейновский и орторомбический пути, фононный спектр, стабильность структуры

1. Введение

Стабильность кристаллической структуры при деформации объемно-центрированных (ОЦК) и гранецентрированных (ГЦК) кубических кристаллов, а также энергетiku структурных превращений можно характеризовать, используя бейновский путь (БП) превращения [1–5]. С устойчивостью структуры связана также идеальная (теоретическая) прочность (ТП) материала [6–8]. Для стабильности структуры энергии фононов должны были быть положительными для всех волновых векторов в зоне Бриллюэна [9]. Для ряда материалов при строго одноосной нагрузке вдоль оси $\langle 001 \rangle$ происходит бифуркация и переход на траекторию орторомбического пути (ОРП) [10]. Это происходит в том числе и для переходного металла (V), являющегося важным материалом в научном (связь электронных топологических переходов и структурно-фазовых превращений) и прикладном (металлургия, важнейший компонент конструкционных сталей и сплавов для ядерных и термоядерных энергетических реакторов) планах [8, 10, 11]. При деформации малых, свободных от дефектов областей прочность материала может достигать ТП. Так, в экспериментах и расчетах наноиндентирования [8, 12, 13] показано, что начало текучести на наноуровне контролируется гомогенным зарождением дислокаций под наноиндентором, где напряжения достигают ТП. Большая деформация типа

бейновской может возникать при псевдоморфной эпитаксии фазы с большой тетрагональной деформацией на субстратах, сохраняющих тетрагональную структуру [3, 14].

В [15–17] приведены результаты ряда работ по электронно-микроскопическим исследованиям эволюции микроструктуры сплавов на основе V и Mo–Re в процессе их прокатки при комнатной температуре. Особенности эволюции объясняются с привлечением механизма прямых и обратных превращений мартенситного типа с осуществлением обратных превращений по альтернативным системам. Основной или единственной модой деформации такого превращения является однородная деформация растяжения-сжатия типа деформации Бейна. Важными особенностями деформации превращения являются ее низкая чувствительность к дефектам субструктурного упрочнения и высокая эффективность релаксации высокодефектных субструктур деформации в условиях фазовой динамической нестабильности кристалла. Это определяет возможность сверхвысокой технологической пластичности сплавов на основе V и Mo–Re, т. е. достижения в процессе деформации прокаткой при комнатной температуре практически неограниченных степеней пластической деформации. Носителями такой деформации являются нанобъемы превращений размерами в несколько нанометров с высокими значениями упругой кривизны кристаллической решетки и локальных градиентов внутренних напряжений.

Ab initio расчеты электронной структуры позволяют изучать фазы с любой кристаллической структурой, что существенно расширяет возможности исследования, и в принципе позволяют количественно определить устойчивость структуры при деформации и идеальную прочность. Проблема нестабильности фононов при деформации рассмотрена в ряде обзоров [3, 7, 8]. Для нахождения наиболее нестабильных как длинноволновых, так и коротковолновых фононов при деформации необходимо провести расчеты фононного спектра в зависимости от деформации во всей неприводимой зоне Бриллюэна, что достаточно трудоемко, и таких исследований мало. Такого рода ab initio расчеты фононного спектра Al проведены в работах [4, 6], где показано, что для данного простого металла ТП ограничена нестабильностью коротковолновых фононов. В работе [11] приведен обзор работ по фазовой стабильности переходных металлов группы VB, а в работе [5] проведены ab initio расчеты фононного спектра в зависимости от деформации во всей неприводимой зоне Бриллюэна, найдена деформация, соответствующая появлению нестабильности фононов и ТП, для одного из металлов данной группы – Nb. Авторы работы [18] методом классической молекулярной динамики показали, что генерация дефектов в Cu при низкой температуре и одноосном сжатии может быть описана в терминах мягких нестабильных фононных мод. В работе отмечена важность расчета фононного спектра во всей неприводимой зоне Бриллюэна (без интерполяции) для правильной оценки устойчивости структуры при деформации. Следует отметить ограниченное число работ по ab initio расчетам фононных спектров металлов во всей неприводимой зоне Бриллюэна при различной деформации с целью обнаружения всех возможных фононных неустойчивостей и нахождения ТП.

2. Постановка задачи и методы решения

Целью данной работы является изучение энергетики БП и ОРП и структурно-фазовых превращений при одноосной деформации вдоль оси $\langle 001 \rangle$ (с релаксацией объема) переходного металла (V). Для анализа устойчивости структуры проведен расчет фононного спектра во всей неприводимой зоне Бриллюэна при различной величине данной деформации.

Первопринципные расчеты упругих постоянных и фононных спектров V проведены с использованием пакета программ для расчета электронной структуры псевдопотенциальным методом плоских волн и моделирования материалов Quantum ESPRESSO (<https://www.quantum-espresso.org>). Использован рекомендованный в данном пакете ультрамягкий псевдопотенциал (V.pbesol-spnl-rrkjus_psl.1.0.0.UPF). Фононные частоты рассчитаны с использованием теории возмущений функционала плотности. Фононные частоты как функция деформации рассчитаны

(без интерполяции) с использованием сетки q -точек $16 \times 16 \times 16$ для получения частот с высокой точностью (следует работам [4–6]).

3. Результаты и обсуждение

Результаты реперных расчетов для проверки качества псевдопотенциала приведены в таблице. Псевдопотенциал удовлетворительно описывает эксперимент с точностью, характерной для расчетов в рамках теории функционала плотности. Для *ab initio* расчетов величины постоянной c_{44} V (и Nb) характерны низкие значения по сравнению с экспериментом, что объясняется нестинггом поверхности Ферми и возможным влиянием дефектов структуры в эксперименте. Более детально данный вопрос обсуждается в работе [10]. Фононные спектры ОЦК-V при нормальном давлении приведены в работе [19] (эксперимент), [20] (расчет) и удовлетворительно согласуются с полученными нами фононными спектрами ОЦК-V.

Таблица

Результаты реперных расчетов параметра решетки a_0 , упругих постоянных c' , c_{44} и объемного модуля упругости B

	Данная работа	Предыдущие расчеты	Эксперимент
$a_0, \text{Å}$	2,96	3,00 [21] 3,00 [22] 2,99 [23]	3,03 [24] 3,02 [25]
$c', \text{ГПа}$	66	59 [10] 63 [26] 38 [27]	56 [28]
$c_{44}, \text{ГПа}$	24	17 [10] 17 [26] 5 [27]	43 [28]
$B, \text{ГПа}$	180	182 [26] 195 [22]	188 [25] 162 [29]

В работе [10] подробно рассмотрена деформация V в результате одноосной нагрузки растяжения вдоль оси $\langle 001 \rangle$, там же приведена схема образующихся структур вдоль БП и ОРП. Симметрия кристалла и особенности ОЦК-переходных металлов группы VB приводят к тому, что при строго одноосной нагрузке возможна бифуркация с бейновского (тетрагонального) на орторомбический путь. Поэтому структуры вдоль обоих путей описываются как в системе отсчета ОЦТ-решетки (удобно описывать в случае бейновского пути), так и в системе отсчета ГЦТ-решетки. Вдоль бейновского (тетрагонального) пути наблюдаются три свободных от напряжения состояния в следующей последовательности (в системе отсчета ОЦТ-решетки): ОЦК, ОЦТ (ГЦК), ОЦТ. В скобках указано название структуры в системе отсчета ГЦТ-решетки. В случае орторомбического пути также наблюдаются три свободных от напряжения состояния (в системе отсчета ГЦТ-решетки): ГЦТ (ОЦК), ГЦТ, ГЦТ (ОЦК). В скобках указаны названия структуры в системе отсчета ОЦТ-решетки. Здесь ОЦТ – объемно-центрированный тетрагональный кристалл, ГЦТ – гранецентрированный тетрагональный кристалл. Данные последовательности указаны ниже на рис. 2 а.

Рассмотрим вышеизложенное изменение структурных состояний конкретно для БП V при одноосной нагрузке вдоль $\langle 001 \rangle$ (рис. 1). Видно, что последовательность состояний при растяжении меняется от ОЦК ($c/a = 1$) через ОЦТ-решетку, соответствующую ГЦК ($c/a = \sqrt{2}$), до ОЦТ ($c/a = 1.8$), где a, c – параметры тетрагональной решетки (рис. 1 а). На отрезках бейновского пути на пике слева и справа от ГЦК-состояния ($c/a = \sqrt{2}$), а также при $c/a < 1$ (одноосной нагрузки сжатия вдоль оси $\langle 001 \rangle$) структуры внутренне нестабильны по отношению к тетрагональной дефор-

магии и определяют деформированные состояния, которые могут быть получены путем псевдоморфной эпитаксии фазы на субстратах с соответствующей тетрагональной структурой. Полученные результаты удовлетворительно совпадают с результатами *ab initio* расчетов из работы [10]. Кривые на рис. 1 качественно совпадают с аналогичными кривыми для ниобия, полученными в исследованиях [5, 10]. Положения трех свободных от напряжения состояний на БП в зависимости от c/a (или деформации) совпадают. Энергия максимума кривой при $c/a = \sqrt{2}$, соответствующего ГЦК-состоянию, для Nb в работе [5] приблизительно в 1,5 раза выше. Приблизительно такое же соотношение данных энергий получено и в работе [10]. Зависимости параметров решетки от c/a на рис. 1 б близки к линейным, как и для Nb.

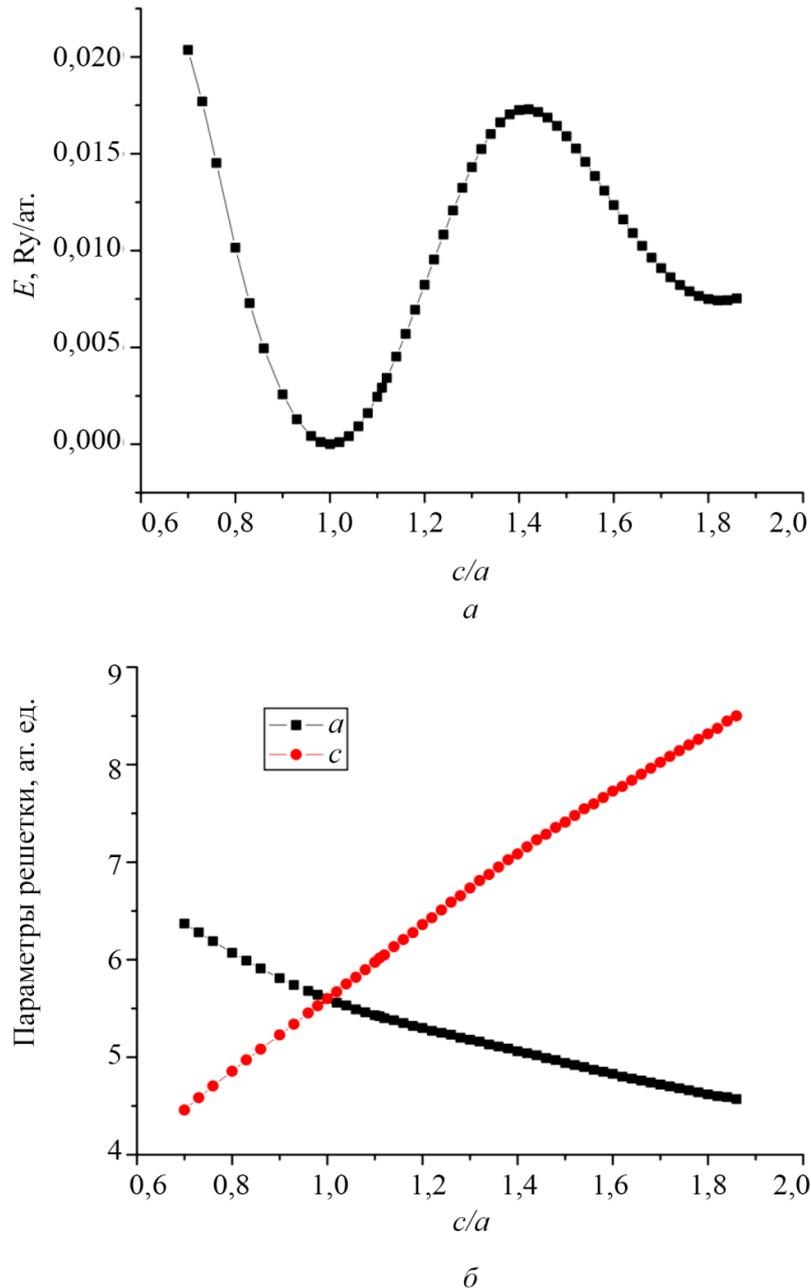


Рис. 1. Изменение полной энергии и параметров решетки a , c в зависимости от величины бейновской (тетрагональной) деформации c/a . Структуры вдоль БП описываются в системе отсчета ОЦТ-решетки.

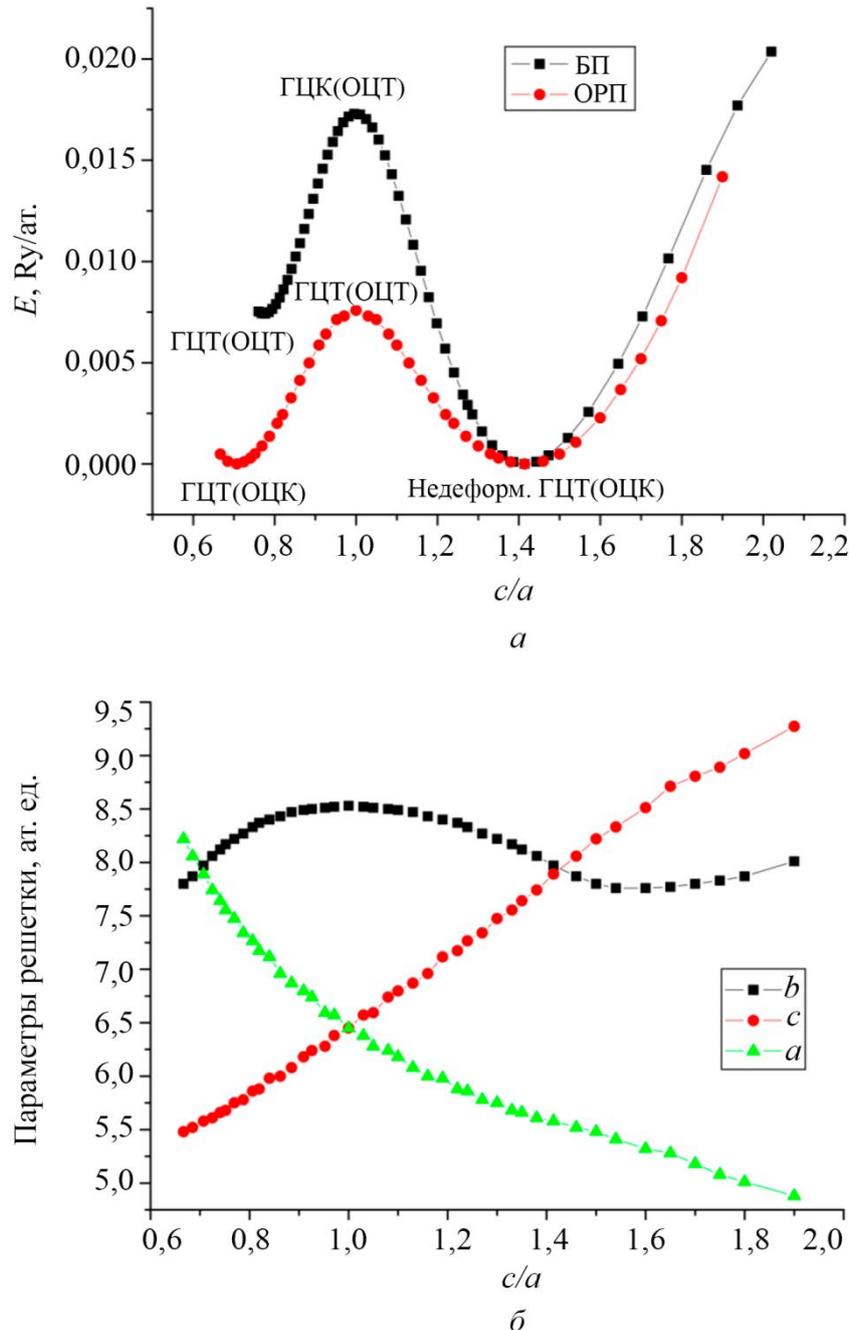


Рис. 2. Бейновский (тетрагональный) и орторомбический пути. Структуры вдоль обоих путей описываются в системе отсчета ГЦТ-решетки (в скобках указаны названия структур в системе отсчета ОЦТ-решетки): зависимость полной энергии для БП и ОРП (а); зависимость параметров решетки для ОРП (б)

На рис. 2 показаны зависимости полной энергии для БП, ОРП и параметров решетки для ОРП от величины c/a , характеризующей деформацию. Подробнее это отражено в работе [10]. Видно, что ОРП является энергетически более выгодным. Ранее было показано [5, 30] для Nb (имеющего качественно похожие БП и ОРП), что ОЦК-фаза, соответствующая $c/a = 1/\sqrt{2} = 0,707$ на ОРП и возникающая при данной одноосной деформации (растяжение вдоль оси a), эквивалентна ОЦК-фазе при $c/a = \sqrt{2}$, но при этом ось a , вдоль которой происходит растяжение кристаллита на ОРП, становится равной оси c в исходном состоянии «Недеформированный ГЦТ (ОЦК) кристалл» (Unstrained fct (bcc)), а ось c , которая сокращается, стано-

вится равной оси a в исходном состоянии «Недеформированный ГЦТ (ОЦК) кристалл». В случае V наблюдается аналогичная картина, и получается (как и для Nb), что отрезки графиков (для ОРП) при $c/a = 1 \dots \sqrt{2}$ и $1 \dots 1/\sqrt{2}$ на рис. 2 обладают зеркальной симметрией относительно вертикальной прямой $c/a = 1$ при надлежащем выборе координаты по оси X [5]. Это позволяет более точно построить графики на рис. 2 для V, как и соответствующие графики для Nb [5]. Следует отметить, что указанная зеркальная симметрия ОРП V (как и других металлов группы VB: Nb, Ta) не была замечена ранее [10], что привело к некоторым незамеченным метастабильным состояниям при расчете структуры при $c/a = 1 \dots 1/\sqrt{2}$. Недавно для Nb в работе [5] были внесены необходимые коррективы.

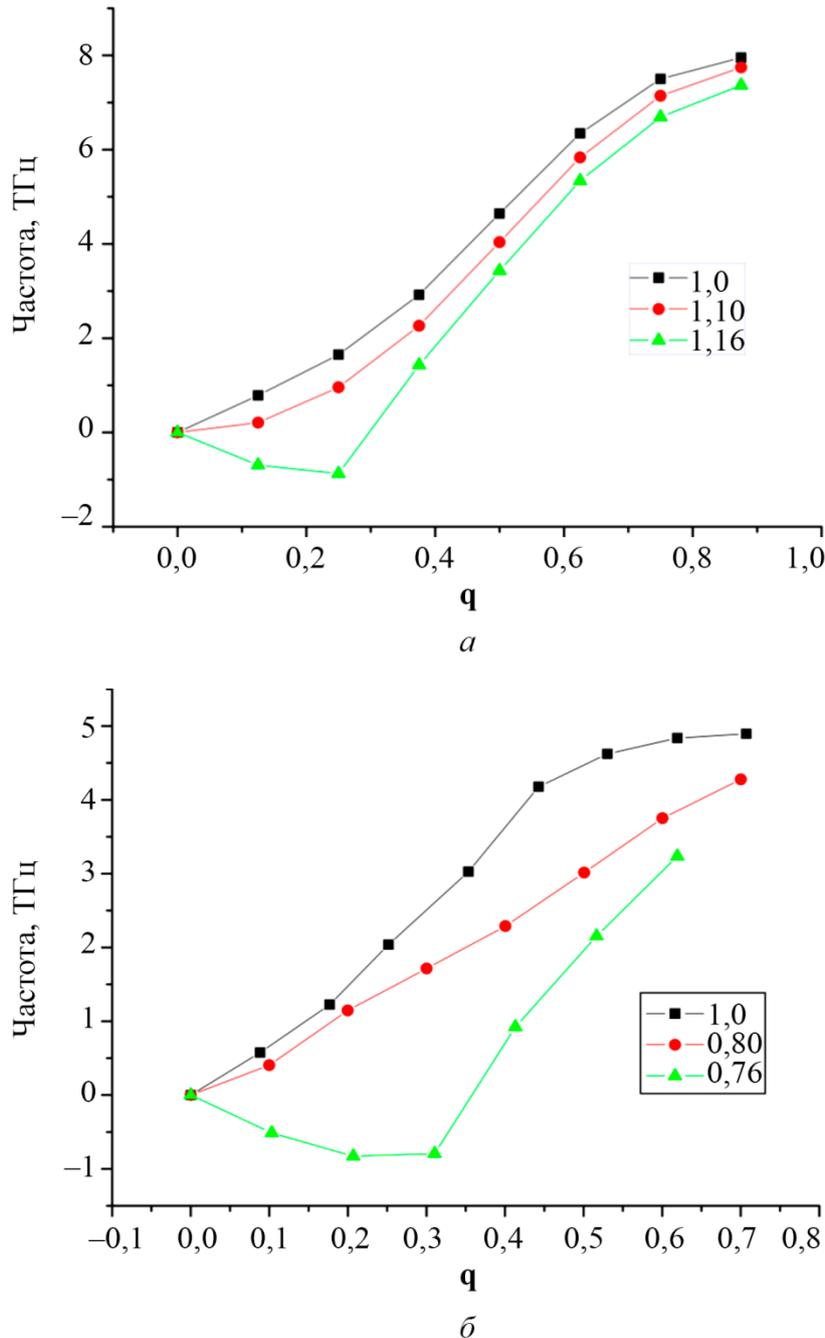


Рис. 3. Фононные частоты для БП (описываются в системе отсчета ОЦТ-решетки (рис. 1): вдоль направления $\langle x00 \rangle$ (а); вдоль $\langle x0x \rangle$ (б). Указаны величины c/a .

Наиболее мягкие ветви фононного спектра (найденные в результате анализа изменения всего фононного спектра при деформации) приведены на рис. 3 в зависимости от величины c/a (для одноосной нагрузки сжатия вдоль оси $\langle 001 \rangle$ вдоль направления волнового вектора $\langle x00 \rangle$ и вдоль $\langle x0x \rangle$ (для одноосной нагрузки растяжения вдоль $\langle 001 \rangle$). Эти ветви фононного спектра соответствуют поперечной поляризации. При $c/a = 1,10 \dots 1,16$ (инженерная деформация $e = 0,1 \dots 0,16$) для ветви $\langle x00 \rangle$ и при $c/a = 0,80 \dots 0,76$ ($|e| = 0,2 \dots 0,24$) для ветви $\langle x0x \rangle$ наблюдается упругая потеря устойчивости структуры. При этом частоты соответствующих фононов становятся мнимыми (на графике отображаются как отрицательные). Полученные результаты для деформации, соответствующей упругой потере устойчивости структуры, можно сравнить с аналогичными результатами, полученными ab initio методом для аналогичной деформации Nb в работе [5]. В указанной работе упругая потеря устойчивости структуры наблюдалась при $c/a = 1,06 \dots 1,10$ для ветви $\langle x00 \rangle$ и при $c/a = 0,86 \dots 0,80$ для ветви $\langle x0x \rangle$. Это говорит о том, что V несколько более стабилен, чем Nb при одноосной деформации.

Следует отметить, что БП и ОРП близки до деформации $e \sim 0,1$ возле состояния «Недеформированный ГЦТ (ОЦК) кристалл» на рис. 2 а при $c/a = \sqrt{2}$. Аналогичная ситуация наблюдалась и в случае Nb. Можно предположить, что полученные результаты по потере устойчивости структуры V при данной одноосной нагрузке для БП будут приблизительно справедливы и для ОРП. Уточнение этого вопроса требует расчета фононного спектра во всей неприводимой зоне Бриллюэна для ОРП, что является отдельной задачей.

Ранее было показано, что упругие и фононные аномалии в V и других металлах группы VB (Nb, Ta) в равновесном состоянии и под давлением связаны со свойствами поверхности Ферми [11, 26]. В частности, мягкая поперечная фононная ветвь вдоль [100] и необычная мягкость c_{44} , как было показано в работе [26], может возникать из-за электронного топологического перехода в V под давлением, в процессе которого развивается шейка на поверхности Ферми вдоль направления $\Gamma-N$, при этом изменяются свойства нестинга поверхности Ферми. В случае одноосной деформации V вдоль БП и ОРП эти вопросы требуют дополнительного изучения.

Полученные результаты могут относиться к ситуациям в эксперименте, когда деформируются малые, свободные от дефектов области, например, в наноструктурированных материалах при модифицировании поверхностных слоев современными методами пластического деформирования, при наноиндентировании. Результаты также могут быть полезны для выявления микроскопических механизмов сверхвысокой технологической пластичности сплавов на основе V и Mo-Re, когда в процессе деформации прокаткой при комнатной температуре достигаются практически неограниченные степени пластической деформации. Носителями такой деформации являются нанобъемы превращений размерами в несколько нанометров с высокими значениями упругой кривизны кристаллической решетки и локальных градиентов внутренних напряжений. Основной или единственной модой деформации такого превращения является однородная деформация растяжения-сжатия типа деформации Бейна [15–17].

4. Заключение

Первопринципным методом на основе теории функционала плотности изучена энергетика бейновского и орторомбического путей структурно-фазовых превращений при одноосной деформации переходного металла (V). Уточнен орторомбический путь превращения с учетом его симметрии. Для бейновского пути первопринципным методом рассчитан фононный спектр во всей неприводимой зоне Бриллюэна в зависимости от деформации. Показано, что для наиболее мягких ветвей фононного спектра при $c/a = 1,10 \dots 1,16$ (инженерная деформация $e = 0,1 \dots 0,16$) для ветви $\langle x00 \rangle$ при растяжении и при $c/a = 0,80 \dots 0,76$ ($|e| = 0,2 \dots 0,24$) для ветви $\langle x0x \rangle$ при сжатии наблюдается упругая потеря устойчивости структуры, определяющая теоретическую прочность. Показана близость свойств V и другого металла VB группы – Nb. Отмечены механизмы упругих и фононных аномалий под давлением (электронный

топологический переход с появлением шейки на поверхности Ферми, нестинг поверхности Ферми), связанные с электронной структурой V и влияющие на устойчивость его кристаллической структуры. В случае деформации вдоль бейновского и орторомбического путей механизмы структурно-фазовых превращений требуют уточнения.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России по теме «Структура» № 122021000033-2. Расчеты проведены с использованием суперкомпьютера «Уран» ИММ УрО РАН.

Литература

1. Bain E. C. The Nature of martensite // Trans. AIME. – 1924. – Vol. 70. – P. 25–35.
2. Effect of magnetic state on the α - γ transition in iron: first-principles calculations of the Bain transformation path / S. V. Okatov, A. R. Kuznetsov, Yu. N. Gornostyrev, V. N. Urtsev, M. I. Katsnelson // Physical Review B. – 2009. – Vol. 79 (9). – P. 094111–094115. – DOI: 10.1103/RevModPhys.84.945.
3. Lattice instabilities in metallic elements / G. Grimvall, B. Magyari-Kope, V. Ozolins, K. A. Persson // Review of Modern Physics. – 2012. – Vol. 84 (3). – P. 945–986. – DOI: 10.1103/PhysRevB.79.094111.
4. Kuznetsov A. R., Starikov S. A., Sagaradze V. V. Phonon instabilities in a metal on the Bain fcc–bcc transformation path // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 6. – P. 86–94. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.6.086-094. – URL: http://dream-journal.org/issues/2022-6/2022-6_385.html
5. Kuznetsov A. R., Starikov S. A. The Bain and orthorhombic paths of the bcc–fcc transformation in a bcc metal // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2023. – Iss. 6. – P. 35–44. – DOI: 10.17804/2410-9908.2023.6.035-044. – URL: http://dream-journal.org/issues/2023-6/2023-6_423.html
6. Phonon instabilities and the ideal strength of aluminum / D. M. Clatterbuck, C. R. Krenn, Marvin L. Cohen, J. W. Morris, Jr. // Physical Review Letters. – 2003. – Vol. 91 (13). – P. 135501–135504. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.135501.
7. Calculations of theoretical strength: State of the art and history / J. Pokluda, M. Cern, P. Sandera, M. Sob // Journal of Computer-Aided Materials Design. – 2004. – Vol. 11. – P. 1–28. – DOI: 10.1007/s10820-004-4567-2.
8. Ab initio calculations of mechanical properties: methods and applications / J. Pokluda, M. Cerny, M. Sob, Y. Umeno // Progress in Materials Science. – 2015. – Vol. 73. – P. 127–158. – DOI: 10.1016/j.pmatsci.2015.04001.
9. Li J., Yip S. Atomistic measures of materials strength // CMES-Computer Modeling in Engineering and Science. – 2002. – Vol. 3. – P. 219. – DOI: 10.3970/cmcs.2002.003.219.
10. Anomalies in the response of V, Nb, and Ta to tensile and shear loading: ab initio density functional theory calculations / N. Nagasako, M. Jahnátek, R. Asahi, J. Hafner // Physical Review B. – 2010. – Vol. 81. – P. 094108–094121. – DOI: 10.1103/PhysRevB.81.094108.
11. Kohn anomaly and phase stability in group VB transition metals / A. Landa, P. Söderlind, I. I. Naumov, J. E. Klepeis, L. Vitos // Computation. – 2018. – Vol. 6. – P. 29. – DOI: 10.3390/computation6020029.
12. Discrete and continuous deformation during nanoindentation of thin films / A. Gouldstone, H. J. Koh, K. Y. Zeng, A. E. Giannakopoulos, S. Suresh // Acta Materialia. – 2000. – Vol. 48 (9). – P. 2277–2295. – DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00009-4.
13. Dislocation emission around nanoindentations on a (001) fcc metal surface studied by scanning tunneling microscopy and atomic simulation / O. R. de la Fuente, J. A. Zimmerman,

- M. A. Gonzales, J. de la Figuera, J. C. Hamilton, W. W. Pai, J. M. Rojo // *Physical Review Letters*. – 2002. – Vol. 88 (3). – P. 036101–036104. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.036101.
14. Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры / под ред. Л. Ченга, К. Плога; пер. с англ. под ред. Ж. И. Алферова, Ю. В. Шмарцева. – Москва : Мир, 1989. – 582 с. – ISBN 5-03-000737-7.
15. Закономерности формирования микроструктуры в условиях сверхвысокой технологической пластичности сплава V–4Ti–4Cr / А. Н. Тюменцев, И. А. Дитенберг, А. С. Цверова, В. М. Чернов, М. М. Потапенко, В. А. Дробышев // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Термоядерный синтез*. – 2018. – Т. 41, вып. 4. – С. 48–64.
16. Закономерности пластической деформации в высокопрочных и нанокристаллических металлических материалах // А. Н. Тюменцев, А. Д. Коротаев, И. А. Дитенберг, Ю. П. Пинжин, В. М. Чернов. – Новосибирск : Изд-во СО РАН, 2018. – 256 с.
17. Пластическая деформация в условиях фазовой нестабильности кристаллической решетки // А. Н. Тюменцев, И. Ю. Литовченко, И. А. Дитенберг, Ю. П. Пинжин, К. В. Гриняев, И. В. Смирнов, В. М. Чернов. – Томск : Издательство НТЛ, 2024. – 212 с.
18. Phonon instabilities in uniaxially compressed fcc metals as seen in molecular dynamics simulations / G. Kimminau, P. Erhart, E. M. Bringa, B. Remington, J. S. Wark // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81. – P. 092102. – DOI: 10.1103/PhysRevB.81.092102.
19. Colella R., Batterman B. W. X-ray determination of phonon dispersion in vanadium // *Physical Review B*. – 1970. – Vol. 1. – P. 3913. – DOI: 10.1103/PhysRevB.1.3913.
20. Savrasov S. Y., Savrasov D. Y. Electron-phonon interactions and related physical properties of metals from linear-response theory // *Physical Review B*. – 1996. – Vol. 54. – P. 16487. – DOI: 10.1103/PhysRevB.54.16487.
21. Ideal strength of random alloys from first principles / X. Li, S. Schonecker, J. Zhao, B. Johansson, L. Vitos // *Physical Review B*. – 2013. – Vol. 87. – P. 214203. – DOI: 10.1103/PhysRevB.87.214203.
22. Suzuki N., Otani M. The role of the phonon anomaly in the superconductivity of vanadium and selenium under high pressures // *Journal Physics: Condensed Matter*. – 2007. – Vol. 19. – P. 125206. – DOI: 10.1088/0953-8984/19/12/125206.
23. Černý M., Pokluda J. Influence of superimposed biaxial stress on the tensile strength of perfect crystals from first principles // *Physical Review B*. – 2007. – Vol. 76. – P. 024115. – DOI: 10.1103/PhysRevB.76.024115.
24. Bolef D. I., Smith R. E., Miller J. G. Elastic properties of vanadium. I. Temperature dependence of the elastic constants and the thermal expansion // *Physical Review B*. – 1971. – Vol. 3. – P. 4100. – DOI: 10.1103/PhysRevB.3.4100.
25. Takemura K. High-pressure X-ray study of Zn with a helium pressure medium // *Proceedings of the International Conference on High Pressure Science and Technology (AIRAPT-17), Honolulu, Hawaii, July 25–30, 1999* / ed. by M. H. Manghnani, W. J. Nellis, M. F. Nicol. – Hyderabad, India : Universities Press, 2000. – Vol. 1. – P. 440–442.
26. Elasticity of the superconducting metals V, Nb, Ta, Mo, and W at high pressure / L. Koči, Y. Ma, A. R. Oganov, P. Souvatzis, R. Ahuja // *Physical Review B*. – 2008. – Vol. 77. – P. 214101. – DOI: 10.1103/PhysRevB.77.214101.
27. Theory of elastic constants of cubic transition metals and alloys / P. Söderlind, O. Eriksson, J. M. Wills, A. M. Boring // *Physical Review B*. – 1993. – Vol. 48. – P. 5844. – DOI: 10.1103/PhysRevB.48.5844.
28. Katahara K. W., Manghnani M. H., Fisher E. Elastic moduli of paramagnetic chromium and Ti-V-Cr alloys // *Journal of Physics F: Metal Physics*. – 1979. – Vol. 9. – P. 773. – DOI: 10.1088/0305-4608/9/11/008.
29. Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*. – New York : Wiley, 1996. – 674 p.
30. Ideal strength of bcc molybdenum and niobium / W. Luo, D. Roundy, M. L. Cohen, J. W. Morris, Jr. // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 66. – P. 094110. – DOI: 10.1103/PhysRevB.66.094110.