

О ТЕРМОФЛУКТУАЦИОННОМ ЗАРОЖДЕНИИ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ В МАТЕРИАЛАХ С ИДЕАЛЬНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ

С. Г. Псахье, К. П. Зольников, Д. С. Крыжевич, А. Г. Липницкий

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск, root@ispms.tomsk.ru

Проведено молекулярно-динамическое исследование термофлуктуационного формирования дефектов структуры в материалах с исходно идеальной кристаллической решеткой при высокоскоростных деформациях. Показано, что тепловые флуктуации могут быть причиной генерации дефектов структуры. При этом существует некоторое пороговое значение деформации, характеризующееся практически скачкообразным ростом областей с локальными структурными изменениями.

Ключевые слова: кристаллическая решетка, молекулярная динамика, тепловые флуктуации.

Одним из наиболее важных аспектов изучения поведения материалов на микроскопическом уровне в условиях динамического нагружения является моделирование процессов формирования структурных искажений и зарождения дефектов структуры, таких как точечные дефекты, дислокации, дефекты упаковки, микротрещины и т. д. Кроме того, детальное исследование атомных механизмов формирования локальных структурных трансформаций, которые можно отнести к так называемым прекурсорным состояниям [1], безусловно является одной из фундаментальных проблем физики твердого тела и материаловедения. В работах [2–6] отмечалось, что природа таких процессов связана прежде всего с тем, что деформируемый материал является сложной, иерархически организованной системой и, следовательно, атомная подсистема неизбежно вовлекается в макроскопический отклик материала на внешние воздействия.

Вопросы исследования механизмов зарождения дефектов применительно к материалам с исходно идеальной структурой в условиях высокоскоростного механического воздействия актуальны с точки зрения развития фундаментальных знаний о закономерностях процесса пластической деформации. Отметим, что, поскольку в материале с идеальной кристаллической структурой отсутствуют концентраторы напряжений, следует ожидать, что ответственными за зарождение локальных структурных изменений и пластической деформации могут быть тепловые флуктуации.

В связи с вышесказанным целью настоящей работы являлось исследование атомных

механизмов, ответственных за зарождение пластической деформации в материале с исходно идеальной структурой при конечной температуре.

Поставленные в работе задачи решались на основе молекулярно-динамического моделирования с использованием потенциалов межатомного взаимодействия, построенных в рамках метода погруженного атома [7–9]. Такие потенциалы позволяют с высокой точностью описывать структурные, механические и энергетические свойства не только внутри объема самого материала, но и на свободных поверхностях и вблизи них [10].

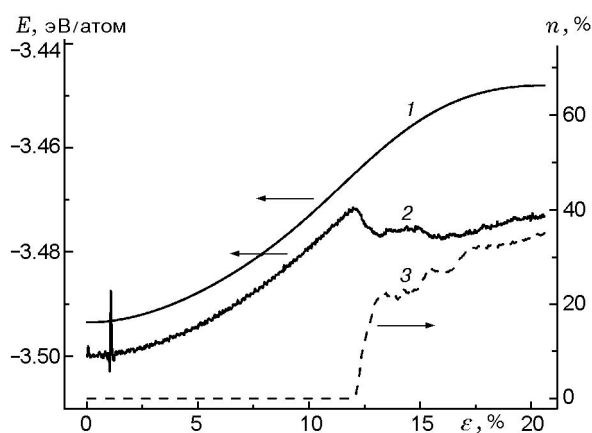


Рис. 1. Потенциальная энергия, приходящаяся на один атом, при температуре 0 (1) и 300 К при скорости сжатия 50 м/с (2). Доля атомов с топологией структурных связей, соответствующей ГПУ-решетке (3)

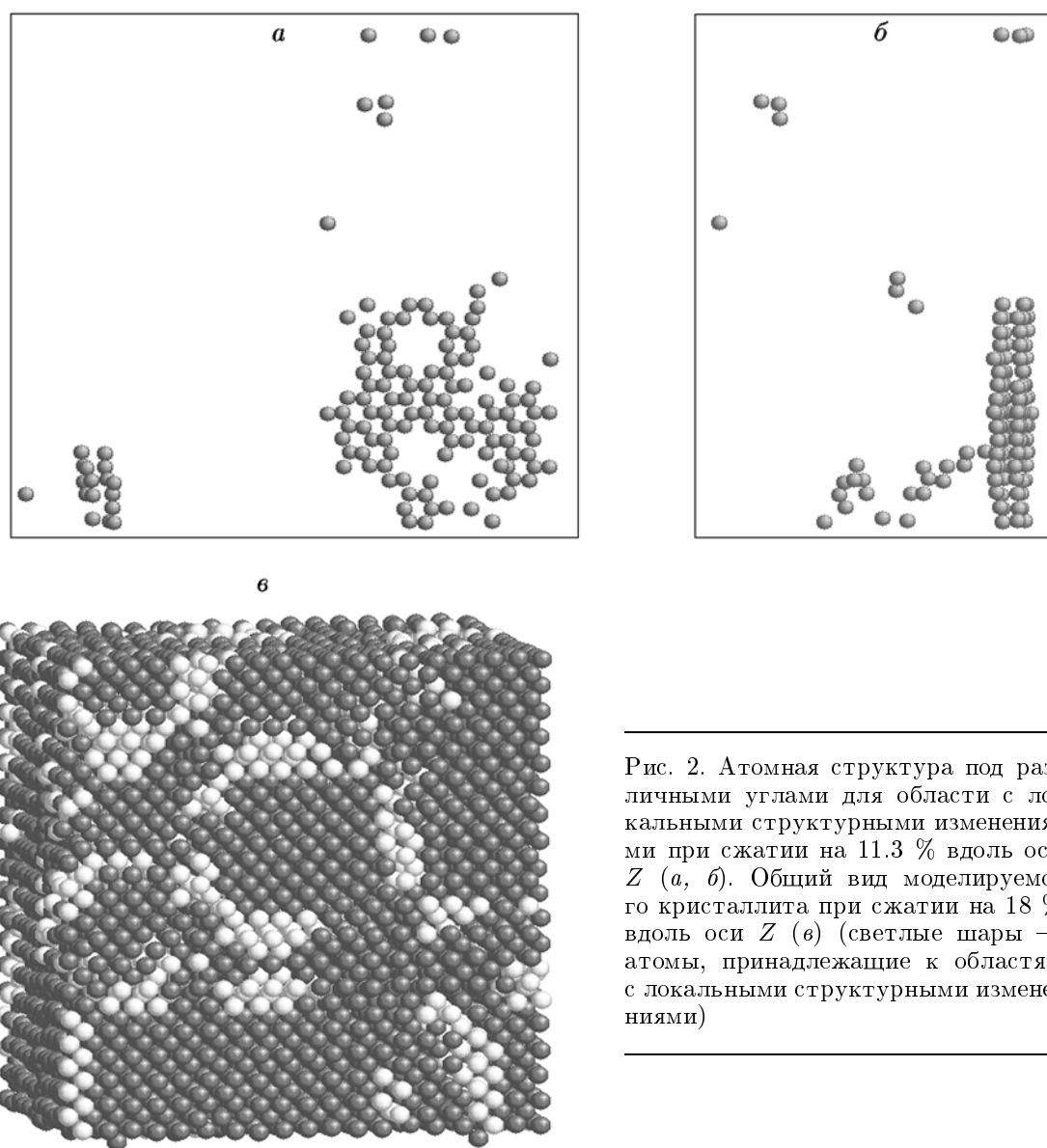


Рис. 2. Атомная структура под различными углами для области с локальными структурными изменениями при сжатии на 11.3 % вдоль оси Z (а, б). Общий вид моделируемого кристаллита при сжатии на 18 % вдоль оси Z (в) (светлые шары — атомы, принадлежащие к областям с локальными структурными изменениями)

Моделируемый кристалл меди имел форму параллелепипеда; для исключения влияния поверхностных эффектов использовались периодические граничные условия во всех направлениях. Анализ структуры деформированного кристалла проводился на основе предложенного в [11] алгоритма, учитывающего топологию структурных связей каждого атома с ближайшими соседями. Согласно этому алгоритму каждой паре атомов сопоставляется набор из четырех чисел. Первое число характеризует «отношения» атомов (1 — если атомы являются соседями, 2 — в противном случае), второе число — количество общих соседей у данной

пары атомов, третье — количество связей между общими соседями, четвертое — количество связей в самой длинной непрерывной цепочке, которая проходит через соседей данной пары. Для идеальной ГЦК-структуры каждый атом характеризуется 12 наборами чисел $\{1/4/2/1\}$, для ГПУ-структуры — 6 наборами $\{1/4/2/1\}$ и 6 наборами $\{1/4/2/2\}$, для ОЦК-структуры — 8 наборами $\{1/0/0/0\}$.

Моделируемый кристаллит меди был ориентирован следующим образом: ось X направлена вдоль кристаллографического направления $[110]$, ось Y — вдоль $[1\bar{1}0]$, ось Z — вдоль $[001]$. Известно, что при равномерном сжатии

ГЦК-кристалла на $\approx 20\%$ вдоль направления $[001]$ и одновременном растяжении на $\approx 12\%$ вдоль направлений $[110]$ и $[\bar{1}\bar{1}0]$ исходная структура трансформируется в ОЦК-структуру. В качестве примера на рис. 1 (кривая 1) приведена зависимость потенциальной энергии, приходящейся на один атом, от степени деформации для случая, когда температура кристалла $T = 0$ К. Для учета влияния температуры исходный кристаллит первоначально релаксировал при комнатной температуре, а затем деформировался вдоль указанных выше направлений.

Результаты расчетов зависимости потенциальной энергии, приходящейся на один атом, от величины деформации кристалла при температуре 300 К и скорости сжатия 50 м/с вдоль оси Z приведены на рис. 1 (кривая 2). Хорошо видно, что учет температуры может привести к существенному изменению хода данной кривой. Для анализа зависимости потенциальной энергии от степени деформирования кривую 2 можно условно разбить на два участка: первый характеризуется ростом потенциальной энергии, второй — ее временным спадом с последующим существенно более медленным возрастанием.

Анализ результатов моделирования показал, что начало второго этапа непосредственно связано с формированием областей локальных структурных изменений (состоящих из атомов с набором чисел, характерных для ГПУ-структуры). Это хорошо видно из сопоставления кривых 2 и 3, последняя из которых представляет долю атомов (n), принадлежащих областям с локальными структурными изменениями. Атомы из данных областей показаны на рис. 2, а, б под разными углами зрения при степени деформации 11.3%. Как следует из анализа взаимного расположения атомов, внутренняя структура данных областей соответствует структуре дефекта упаковки. Общий (трехмерный) вид кристаллита для более поздней деформации (18%) показан на рис. 2, в; видно, что данные области ориентированы вдоль определенных кристаллографических направлений. Следует отметить, что в процессе деформирования наряду с областями локальных структурных изменений возникают зоны искажений кристаллической решетки, которые не ассоциируются с ГПУ-структурой. Их возникновение носит флуктуационный характер. Часть из них впоследствии трансформируется

в структурные изменения с ГПУ-симметрией, что проявляется в пилообразной форме кривой 2 на рис. 1.

Таким образом, впервые на основе прямого молекулярно-динамического моделирования показана возможность термофлуктуационного механизма зарождения дефектов структуры в материалах с идеальной кристаллической решеткой при динамическом нагружении. Установлено, что существует некоторое пороговое значение деформации, при котором происходит практически скачкообразный рост областей локальных структурных изменений. При этом, хотя система нагружения намеренно была выбрана для направленного изменения симметрии, соответствующего переходу к ОЦК-структуре, топология данных областей соответствовала ГПУ-решетке. Такое поведение, очевидно, связано с относительно близкими значениями энергий ГЦК- и ГПУ-структурных состояний.

ЛИТЕРАТУРА

1. Полухин В. А. Моделирование наноструктуры и прекурсорных состояний. Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 2004.
2. Панин В. Е. Основы физической мезомеханики // Физ. мезомеханика. 1998. Т. 1, № 1. С. 5–22.
3. Лихачев В. А., Панин В. Е., Засимчук Е. Э. и др. Кооперативные деформационные процессы и локализации деформации. Киев: Наук. думка, 1989.
4. Лихачев В. А., Волков А. Е., Шудегов В. Е. Континуальная теория дефектов. Л.: Изд-во ЛГУ, 1986.
5. Панин В. Е. Синергетические принципы физической мезомеханики // Физ. мезомеханика. 2000. Т. 3, № 6. С. 5–36.
6. Псахье С. Г., Зольников К. П. О возможности вихревого механизма перемещения границ зерен при высокоскоростном сдвиговом нагружении // Физика горения и взрыва. 1998. Т. 34, № 3. С. 126–128.
7. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. 1984. V. B29, N 12. P. 6443–6453.
8. Mishin Y. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // Phys. Rev. 2001. V. B63. 224106.
9. Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S. Embedded-atom-method for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. 1986. V. B33, N 12. P. 7983–7991.

10. Псахье С. Г., Зольников К. П., Уваров Т. Ю. О новом подходе к нанесению многослойных сверхтонких покрытий. Эффекты перемешивания // Физика горения и взрыва. 2000. Т. 36, № 4. С. 137–139.
11. Van Swygenhoven H., Farkas D., Caro A. Grain-boundary structures in polycrystalline metals at the nanoscale // Phys. Rev. 2000. V. B62, N 2. P. 831–838.

Поступила в редакцию 27/VII 2005 г.
