

05.1

Молекулярно-динамическое исследование динамических вихревых дефектов как механизма релаксации нагруженного твердого тела

© А.И. Дмитриев, С.Г. Псахье

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
E-mail: dmitr@usgroups.com

Поступило в Редакцию 2 декабря 2003 г.

На основе метода молекулярной динамики исследуются процессы, протекающие в нагруженном твердом теле. Показано, что формирование динамических вихревых структур возможно не только на стадии активного нагружения материала, но и на стадии релаксации напряжений. Атомные смещения в этом случае могут формировать согласованную систему вихревых нитей. Установлено, что время жизни таких динамических дефектов может достигать десятков пикосекунд, а их характерные размеры составляют нанометры. Показано, что такая система вихревых нитей может менять знак угловой скорости таким образом, что наблюдаемые на разных интервалах времени атомные смещения практически компенсируют друг друга. Также отмечается, что формирование аналогичных динамических вихреподобных структур наблюдается и на активной стадии нагружения материала, но в этом случае оно не носит периодического характера.

Хорошо известно, что неоднородное распределение смещений при механическом нагружении реальных материалов может приводить к необратимым локальным структурным превращениям, которые принято рассматривать как дефекты, посредством которых осуществляется необратимая или пластическая деформация [1]. Формирование подобных дефектов является способом сохранения сплошности материала, когда согласованное движение атомов становится невозможным [2]. В то же время в ряде работ [3–5] была показана возможность существования так называемых динамических дефектов вихревого характера, которые возникают при высокоскоростном нагружении материалов. Эти дефекты представляют собой согласованное вихревое движение достаточно

большого числа атомов и существуют только на определенных этапах процесса нагружения, обеспечивая совместность атомных смещений. Хотя непосредственное наблюдение таких дефектов практически невозможно вследствие их малого масштаба и времени жизни, их влияние на процесс деформации образца в целом может носить мезоскопический и даже макроскопический характер. Так, в работах [3,4] показано, что вихревые динамические дефекты могут обеспечить аномально высокую скорость миграции границ зерен при высокоэнергетических воздействиях. Следует отметить, что, как правило, вихревые динамические дефекты формируются вблизи границ раздела либо вблизи свободной поверхности. Это объясняется необходимостью свободного объема для реализации коллективного вихревого поведения атомной подсистемы.

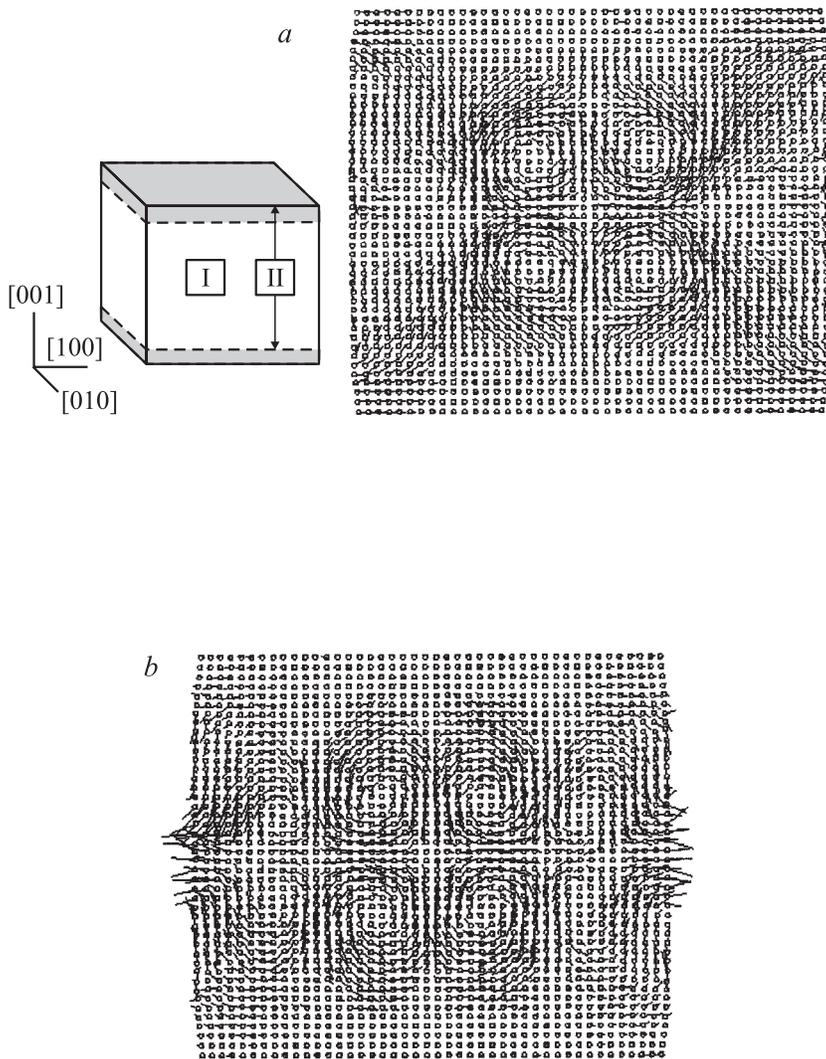
До сих пор полагалось, что динамические дефекты существуют только на активной стадии процесса нагружения, когда навязанные скорости смещений существенно выше характерного времени генерации традиционных дефектов. В то же время в рамках физической мезомеханики подчеркивается роль поворотной моды деформации как одного из важных механизмов сброса внутренних напряжений [6]. Поэтому в настоящей работе была поставлена задача исследования возможности формирования вихревых динамических дефектов на стадии релаксации внутренней структуры материала, т. е. после снятия активного нагружения. С этой целью в настоящей работе на основе метода молекулярной динамики проведено изучение процессов релаксации кристаллита меди со свободной поверхностью, предварительно нагруженного в режиме сжатия до степени деформации, предшествующей пластическому течению.

Схематическое изображение моделируемого кристаллита представлено на рисунке, *a*. Область I представляла собой свободно деформируемую часть кристаллита, а области II реализовывали так называемые струнные (string) граничные условия [7], которые используются для имитации внешних воздействий. В данном случае в направлении [001] проекции скоростей атомов в областях II фиксировались, а в направлениях, отличных от [001], определялись соответствующим атомным окружением. Для учета протяженности моделируемого фрагмента в направлении [010] использовались периодические граничные условия, а в направлении [100] моделировались свободные границы. Межатомные взаимодействия описывались в рамках метода погруженного атома [8].

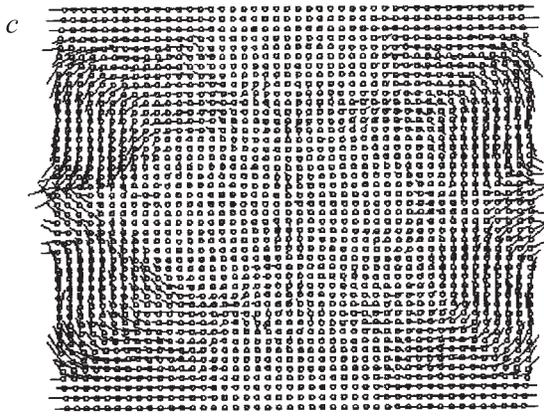
Для избежания наведенных эффектов, связанных с симметрией идеальной решетки, кристаллит меди нагревался до температуры 20 К. Конечная температура в моделируемом кристаллите задавалась на основе распределения Максвелла для атомных скоростей. На первом этапе моделируемый кристаллит подвергался сжатию, для чего области II смещались со скоростями -50 и 50 m/s соответственно. Нагружение продолжалось до степени деформации, предшествующей пластическому течению, после чего кристаллит релаксировался. Детальное исследование процесса релаксации проводилось на основе изучения эволюции атомных конфигураций и атомных смещений в различные моменты времени.

Результаты исследования показали, что в процессе релаксации в моделируемом кристаллите наблюдаются согласованные вихреподобные смещения атомов. Так, на рисунке приведены смещения атомов фрагмента моделируемого кристаллита за различные интервалы времени в плоскости, параллельной плоскости (010). Следует подчеркнуть, что для наглядности изображения отрезки, соответствующие атомным смещениям, увеличены в 10 раз. На рисунке, *a*, где показаны атомные смещения за определенный временной интервал, хорошо видно, что в центральной области фрагмента формируются 4 вихревые нити, движение атомов в которых осуществляется вокруг осей, сонаправленных с осью [010], а их диаметр достигает 12 межплоскостных расстояний. Отметим, что направления вращения вихревых нитей согласованы таким образом, что соседствующие пары „вихрей“ вращаются с противоположными знаками угловых скоростей, тем самым смещения атомов по их границам согласуются без нарушения сплошности материала. Расчеты показали, что в процессе релаксации система из 4 вихревых нитей, приведенная на рисунке, *a*, периодически меняет знак угловой скорости, т.е. меняется направление вращения всех четырех „вихрей“. Так, на рисунке, *b* приведены смещения атомов, соответствующие последующему временному интервалу. Хорошо видно, что движение атомов в вихревых нитях осуществляется в обратном направлении.

Следует отметить, что если построить результирующие смещения атомов за период времени, включающий в себя оба временных интервала (с разными направлениями вращения вихревых нитей), то, как видно на рисунке, *c*, положения атомов в этом случае остаются практически неизменными. Другими словами, атомные смещения, наблюдаемые на



Смещение атомов моделируемого кристаллита на различных интервалах времени: a — $(50-125) \cdot 10^3$, b — $(125-150) \cdot 10^3$, c — $(50-150) \cdot 10^3$ атомных единиц времени. Одна атомная единица времени соответствует $2.4189 \cdot 10^{-17}$ s.



Продолжение рисунка.

интервалах времени, соответствующих рисунку, a и b , практически компенсировали друг друга, и атомы из данной области, совершив согласованные колебания, вернулись в свои прежние положения. В то же время результирующие смещения атомов в других областях кристаллита (особенно вблизи свободной поверхности) заведомо не равны нулю. Анализ результатов показал, что смена направления вращения вихревых нитей может быть рассмотрена как механизм сброса внутренних напряжений и преодоления потенциальных барьеров при движении системы к равновесному состоянию.

Таким образом, траектория рассматриваемой системы в фазовом пространстве на этапе релаксации атомной структуры включает в себя сложные движения атомов, с которыми могут быть ассоциированы динамические вихревые дефекты. Как показали проведенные расчеты, время жизни таких динамических дефектов может достигать десятков пикосекунд, а их характерные размеры составляют нанометры. Отметим, что, как и в указанных выше работах, формирование динамических вихревых структур наблюдается и на этапе активного нагружения. Ориентация „вихрей“ в этом случае также совпадает с направлением $[010]$.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта президента РФ № НШ–2324.2003.1, гранта МО РФ № PD02–1.5–425 и гранта CRDF (TO–016–02).

Список литературы

- [1] *Де Вит Р.* Континуальная теория дисклинаций. М.: Мир, 1977. 208 с.
- [2] *Лихачев В.А., Волков А.Е., Шудегов В.Е.* Континуальная теория дефектов. Л.: Изд-во ЛГУ, 1986. 232 с.
- [3] *Psakhie S.G., Korostelev S.Yu., Negreskul S.I.* et al. // *Phys. Stat. Sol.* 1993. V. B176. P. K41–K44.
- [4] *Псахье С.Г., Зольников К.П.* // *ФГВ.* 1998. Т. 34. № 3. С. 126–128.
- [5] *Псахье С.Г., Дмитриев А.И.* // *ЖТФ.* 1994. Т. 64. № 8. С. 186–190.
- [6] *Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов:* В 2-х т. / Под ред. В.Е. Панина. Новосибирск: Наука, 1995. 297 с. и 320 с.
- [7] *Мелькер А.И., Михайлин А.И., Байгузин Е.Я.* // *ФММ.* 1987. Т. 64. № 6. С. 1066–1070.
- [8] *Daw M.S., Baskes M.I.* // *Phys. Rev.* 1984. V. B29. N 12. P. 6443–6453.