

05.1

О возможности структурной неустойчивости при релаксации деформированного кристалла. Молекулярно-динамическое исследование

© А.И. Дмитриев, С.Г. Псахье

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

Поступило в Редакцию 5 ноября 2004 г.

Исследуются особенности развития упругой и пластической деформации в материале непосредственно после прекращения активной фазы нагружения. Исследования проведены на основе компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. Показано, что в зависимости от величины деформации, достигнутой на этапе активного нагружения, релаксация кристалла может развиваться различными путями. Так, в работе выявлен интервал значений деформации, особенностью которого является состояние неустойчивого равновесия кристаллической решетки, когда небольшие изменения степени сжатия приводят к существенному изменению характера формирования полос локализации атомных смещений. Полученные результаты могут иметь существенное значение при изучении влияния „инерционности“ процесса структурных изменений материала на развитие пластической деформации.

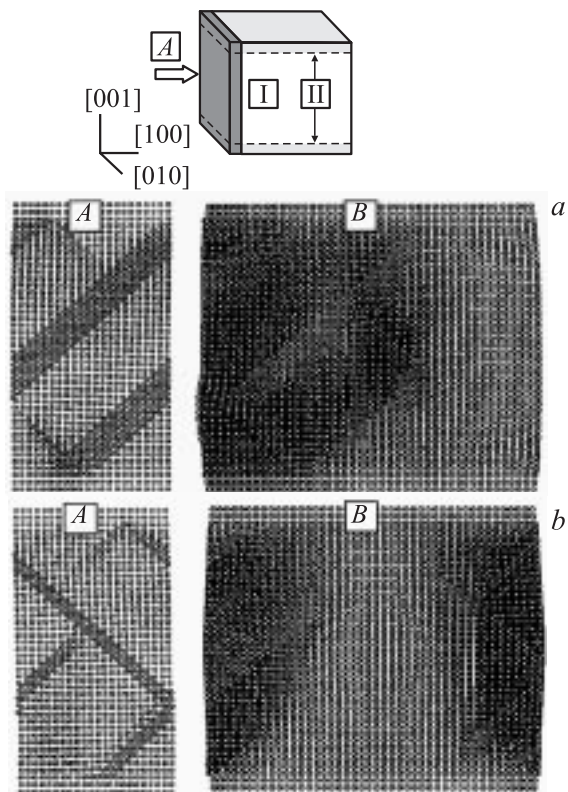
При изучении элементарных актов и механизмов развития пластической деформации следует учитывать „инерционность“ хода развития структурных изменений материала, поскольку аккомодационные процессы могут отставать от внешнего воздействия, а следовательно, как упругие смещения, так и структурные изменения могут идти в материале и после прекращения активного нагружения [1,2]. Это связано с тем, что для достижения равновесной конфигурации (или возврата в исходное состояние) требуется время, определяемое особенностями релаксационных процессов. Влияние „инерционности“ материала может проявляться, например, при смене режима деформирования или при циклическом нагружении. Следует ожидать, что наиболее явно эти эффекты можно проследить после прекращения активного нагружения.

Следует отметить, что класс релаксационных явлений наряду с длительными и пространственно протяженными включает в себя также быстрые и локализованные процессы. Экспериментальное изучение последних встречает значительные трудности. Поэтому задача теоретического изучения особенностей развития упругой и пластической деформации в материале непосредственно после прекращения активной фазы нагружения, безусловно, является актуальной. В силу вышесказанного в настоящей работе исследование особенностей развития деформации материала на начальной стадии процесса релаксации, т.е. непосредственно после прекращения активного нагружения, проводилось на основе молекулярно-динамического моделирования.

Исследовался кристаллит меди, предварительно подвергнутый механическому нагружению до определенного уровня. Кристаллит имел форму параллелепипеда, ребра которого были сонаправлены с кристаллографическими направлениями [100], [010] и [001]. Размеры кристаллита в атомных единицах длины были равны соответственно 150, 75 и 150. Одна атомная единица длины соответствует $0.529177 \cdot 10^{-10}$ м [3]. Схема моделируемого кристаллита показана на рисунке, где I — деформируемая область, а II — области, движения которых имитируют внешнюю нагрузку. Для данных областей были использованы струнные (string) граничные условия [4]. В направлении [010] использовались периодические граничные условия, а в направлении [100] моделировались свободные границы. Межатомные взаимодействия описывались в рамках метода погруженного атома [5,6]. Нагружение кристаллита осуществлялось в два этапа.

На первом этапе (активная стадия) для моделирования динамического сжатия атомам из верхней и нижней областей II присваивались постоянные скорости вдоль направления [001], равные -50 и 50 м/с соответственно. В работе была проведена серия вычислений, в которых нагружение продолжалось до различных степеней деформации, вплоть до деформации, соответствующей началу пластического течения.

На втором этапе (пассивная стадия) изучались особенности релаксации кристаллита. Релаксация проводилась в условиях прекращения нагружения и сохранения достигнутой деформации путем фиксирования положения атомов из областей II вдоль направления нагружения — [001]. Отметим, что в направлениях, отличных от [001], на обоих этапах нагружения положения атомов не фиксировались, и их координаты определялись атомным окружением на основе решения уравнений



Структура кристалла на этапе релаксации в момент зарождения полос локализированных атомных смещений при различной величине деформации, достигнутой на этапе сжатия: a — 10%, b — 10.5%.

движения. Анализ особенностей процесса релаксации в настоящей работе иллюстрируется на основе изменения атомных конфигураций кристаллита. Для избежания наведенных эффектов, связанных с идеальностью исходной кристаллической решетки, образец предварительно нагревался до температуры 20 К.

Результаты исследований показали, что при активном нагружении пластическая деформация в моделируемом кристаллите наблюдается начиная со степени сжатия, соответствующей деформации $\varepsilon \sim 12\%$.

Было обнаружено, что если величина деформации, достигнутая в ходе первого этапа моделирования, составляет менее 9.7%, то в процессе релаксации структурных изменений в моделируемом образце не наблюдается. Изучение процесса релаксации при степенях деформации более 9.7%, показало, что в рассматриваемом кристаллите происходят структурные изменения, которые проявляются в виде формирования и развития полос локализации атомных смещений, зарождающихся на свободной поверхности. Источники зарождения полос локализации атомных смещений находятся в зонах концентраторов напряжений, а именно в середине свободных поверхностей и в зонах контакта деформируемой области I с граничными областями II, моделирующими внешнюю нагрузку. Расчеты показали, что в процессе релаксации, начинающейся в интервале степеней деформации 9.7–11% существует область неустойчивости, что проявляется в том, что достаточно небольшие изменения степени сжатия (в пределах 0.3%) вызывают существенное изменение характера формирования полос локализации атомных смещений. Это иллюстрируется на рисунке, где показано отличие структуры моделируемого кристаллита в процессе релаксации для разных степеней деформации, достигнутых при сжатии. Приведенные на рисунке атомные конфигурации соответствуют проекциям структуры моделируемого кристаллита на различные плоскости, а именно: конфигурации, маркированные как „А“, соответствуют проекции на плоскость (100), а конфигурации „В“ — проекции моделируемого кристаллита на плоскость (010). Для наглядности отображения проекций на плоскость (100) (конфигурации „А“) на рисунке показаны проекции только первых трех атомных плоскостей, расположенных со стороны свободной поверхности, как это изображено на схеме (см. рисунок). Хорошо видно, что полосы локализации атомных смещений для случая, показанного на рисунке, *a* зарождаются только на одной из свободных поверхностей, в то время как в случае, показанном на рисунке, *b* — на обеих. Было обнаружено, что первоначально полоса локализации атомных смещений для первого случая (см. рисунок, *a*), зарождается вблизи контакта деформируемой области I с граничными областями II, а для случая, показанного на рисунке, *b*, зарождение первоначальных полос происходит в зоне контакта областей I и II, а также на середине свободной поверхности. Сформировавшиеся полосы локализации атомных смещений имеют отличные конфигурации, хотя

смещения атомов в обоих случаях ориентированы преимущественно в направлениях $[0\bar{1}1]$ и перпендикулярных им $[011]$.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что в ходе релаксации нагруженного кристалла возможно существование области неустойчивого равновесия. В зависимости от степени деформации эволюция к равновесной конфигурации может развиваться различными путями. Отметим, что вне области неустойчивого равновесия достижение новой равновесной конфигурации осуществляется только по одному „сценарию“.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Министерства образования РФ № PDO2–1.5–425, гранта „Фонда содействия отечественной науки“ и гранта Американского фонда гражданских исследований и развития № TO–016–02.

Список литературы

- [1] Хон Ю.А. // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 7. С. 79–82.
- [2] Псахье С.Г., Уваров Т.Ю., Зольников К.П., Андержанов К.И., Руденский Г.Е. // Физ. мезомех. 2000. Т. 3. № 4. С. 29–32.
- [3] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 428 с.
- [4] Мелькер А.И., Михайлин А.И., Байгузин Е.Я. // ФММ. 1987. № 64. № 6. С. 1066–1070.
- [5] Daw M.S., Baskes M.I. // Phys. Rev. 1984. V. B29. N 12. P. 6443–6453.
- [6] Псахье С.Г., Зольников К.П. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 14. С. 43–48.