

05

Эффекты нанофрагментации при релаксации нагруженного твердого тела. 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 16 марта 2004 г.

Исследована возможность нанофрагментации материала в приповерхностных слоях на начальных стадиях процесса релаксации. Исследования проведены на основе компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. Показано, что на начальном этапе процесса релаксации возможно формирование разориентированных наноблоков. Фрагментированная структура формируется в области локализованной деформации вблизи концентраторов напряжений и распространяется в глубь материала. Показано, что в области локализации деформации функция радиального распределения атомной плотности имеет вид размытых пиков, соответствующих пикам идеальной гранецентрированной кристаллической (ГЦК) структуры, а в области кристаллита, где локализация деформации не наблюдается, происходит расщепление пиков ГЦК-структуры, обусловленной деформационным нарушением симметрии. Полученные результаты дают возможность утверждать, что возможным механизмом релаксации внутренних напряжений в постнагруженных твердых телах является эффект нанофрагментации материала.

Понимание элементарных актов и механизмов развития пластической деформации, безусловно, является одной из ключевых задач материаловедения, физики прочности и пластичности. Наряду с традиционными механизмами в рамках физической мезомеханики подчеркивается исключительная роль процессов фрагментации с вовлечением поворотной моды деформации [1–3]. При этом, как показано в [3], необходимо учитывать влияние поверхности как особого состояния твердого тела. Как правило, подобные явления изучаются на активной стадии нагружения. В то же время характерные скорости таких процессов достаточно малы, что делает возможным их реализацию на начальных

этапах релаксации или смены режима деформирования, например при усталостном нагружении. Поэтому задача изучения возможности фрагментации материала на начальных стадиях процесса релаксации, безусловно, является актуальной. Экспериментальное изучение подобных явлений встречает значительные трудности ввиду предельно малых их временных и пространственных параметров.

В силу вышесказанного в настоящей работе была поставлена задача молекулярно-динамического исследования особенностей пластической деформации материала вблизи свободной поверхности на начальной стадии процесса релаксации материала, т.е. непосредственно после снятия активного нагружения.

С этой целью в настоящей работе изучался отклик кристаллита меди, предварительно подвергнутого механическому нагружению. Кристаллит имел форму параллелепипеда, ребра которого были сонаправлены с кристаллографическими направлениями [100], [010] и [001], и состоял из трех областей. Центральная область представляла собой деформируемый кристаллит, а приграничные области кристаллита в плоскостях, параллельных плоскости (001), имитировали внешнюю нагрузку. В настоящей работе для них использованы так называемые струнные (string) граничные условия [4], когда в одном направлении, в данном случае в направлении [001], проекции скоростей атомов фиксировались. Поведение же атомов в направлениях, отличных от [001], не являлось заданным, а определялось атомным окружением. Для учета протяженности моделируемого фрагмента в направлении [010] использовались периодические граничные условия. В направлении [100] моделировались свободные границы. Межатомные взаимодействия описывались в рамках метода погруженного атома [5,6]. Для избежания наведенных эффектов, связанных с симметрией идеальной решетки, кристаллит меди нагревался до температуры 20 К. Нагружение задавалось после достижения атомной структурой равновесного состояния при данной температуре. На первом этапе исследования моделируемый кристаллит подвергался сжатию, для чего граничные области, имитирующие внешнюю нагрузку, смещались со скоростями 50 м/с. Динамическое воздействие продолжалось до различных значений степени деформации, после чего кристаллит релаксировал.

Детальное исследование процесса релаксации проводилось на основе изучения эволюции атомных конфигураций и построения функций радиального распределения атомной плотности (RDF) [7]. Результаты

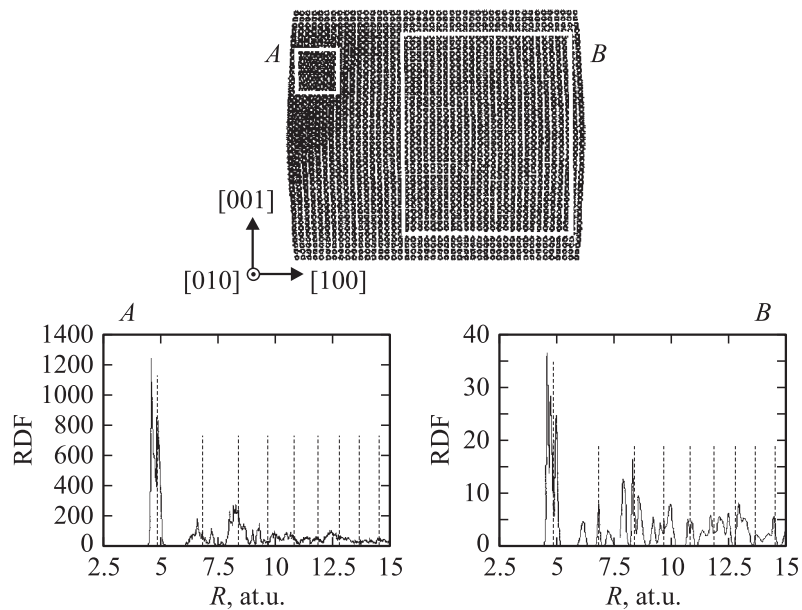


Рис. 1. Структура и функции радиального распределения атомной плотности фрагментов *A* и *B* моделируемого кристаллита в момент зарождения полосы локализации деформации. Пунктиром на рисунке отмечено положение пиков RDF идеальной ГЦК-решетки. Одна атомная единица (at.u.) длины соответствует $0.529177 \cdot 10^{-10}$ м.

исследования показали, что в процессе релаксации в моделируемом кристаллите наблюдается формирование и развитие полос локализации деформации. Детальный анализ показал, что их зарождение происходит на свободной поверхности. При этом источники зарождения полос локализации деформации находятся в зонах концентраторов напряжений, а именно в серединной части свободных поверхностей и в зонах контакта деформируемой области с граничными областями, имитирующими внешнюю нагрузку. Это хорошо видно на рис. 1, где показана структура фрагмента моделируемого кристаллита в момент времени, соответствующий началу процесса формирования полосы локализации деформации. Видно, что локализация деформации, зарождаясь на поверхностях, затем распространяется в глубь материала.

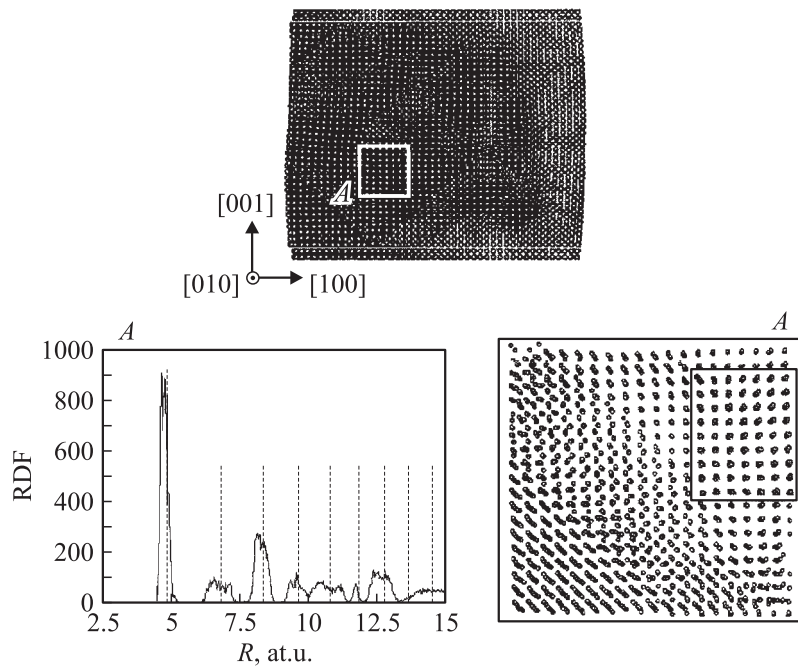


Рис. 2. Функция радиального распределения атомной плотности и структура фрагмента *A* фрагментированного моделируемого кристаллита. Рамкой на структуре фрагмента *A* выделен один из сформировавшихся наноблоков.

Детальный анализ функции радиального распределения атомной плотности для различных фрагментов моделируемого кристаллита показал, что формирование полосы локализации деформации сопровождается перестройкой атомной структуры. На рис. 1 хорошо видно, что происходит трансформация пиков RDF от ярко выраженных „расщепленных“ основных пиков в случае деформированной решетки к размытым единичным пикам, соответствующим пикам ГЦК-решетки, в области локализованной деформации.

Дальнейший анализ развития процесса релаксации позволил выявить механизмы перестройки атомной структуры. На рис. 2 приведена структура моделируемого кристаллита в последующий момент времени. Хорошо видно, что фрагментированная область распространилась прак-

тически на весь кристаллит. Таким образом, процесс развития пластической деформации на этапе релаксации может осуществляться путем формирования разориентированных кристаллических наноблоков. При этом кристаллическая структура отдельных фрагментов имеет ГЦК-структуру. Об этом свидетельствует функция радиального распределения атомной плотности для одного из сформировавшихся блоков, приведенная на рис. 2. Размытость пиков RDF, соответствующих пикам идеальной ГЦК-решетки, объясняется существованием межблочных границ, а также взаимным влиянием блоков друг на друга.

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

Список литературы

- [1] *Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов.* В 2 т. / Под ред. В.Е. Панина. Новосибирск: Наука, 1995. 297 с. и 320 с.
- [2] *Панин В.Е.* // Физ. мезомех. 2000. Т. 4. № 3. С. 5–22.
- [3] *Панин В.Е., Фомин В.М., Титов В.М.* // Физ. мезомех. 2003. Т. 6. В. 2. С. 5–14.
- [4] *Мелькер А.И., Михайлин А.И., Байгузин Е.Я.* // ФММ. 1987. Т. 64. В. 6. С. 1066–1070.
- [5] *Зольников К.П., Уваров Т.Ю., Псахье С.Г.* // Письма в ЖТФ. 2001. Т. 27. В. 7. С. 1–7.
- [6] *Псахье С.Г., Зольников К.П.* // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 14. С. 43–48.
- [7] *Полухин В.А., Ухов В.Ф., Дзугутов М.М.* Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов. М.: Наука, 1981. 240 с.