

05

Моделирование поведения границы зерен $\Sigma 5$ при комбинировании термического и сдвигового внешнего воздействия

© А.И. Дмитриев, А.Ю. Никонов

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

Поступило в Редакцию 20 марта 2013 г.

Проведено молекулярно-динамическое исследование поведения границы зерен бикристалла меди в условиях сдвигового нагружения. В качестве объекта исследования выбрана высокоугловая граница специального типа $\Sigma = 4(210)[001]$. Анализировалось влияние температуры образца на особенности поведения границы зерен при сдвиговой деформации. Показано, что при нагреве образца выше определенной температуры обнаруженный ранее механизм зернограничного проскальзывания в ГЦК-кристаллах, сопровождаемый одновременным перемещением границы в направлении, перпендикулярном приложенному воздействию, уступает место традиционному механизму зернограничного скольжения, связанному с относительным смещением зерен относительно друг друга вдоль плоскости дефекта. Исследованы особенности изменения структуры межзеренной границы при смене ее отклика на сдвиговую деформацию с ростом температуры.

Изучение механизмов пластического деформирования поликристаллических материалов, безусловно, является одной из ключевых проблем современного материаловедения. Этому вопросу посвящено большое число как экспериментальных, так и теоретических работ [1,2]. Установлено, что характер развития пластической деформации определяется условиями нагружения и характерным размером зерна поликристаллического материала. Для крупнозернистого материала определяющим является дислокационный механизм деформирования, приводящий к зарождению полос локализации. При уменьшении размера зерна доминирующим механизмом деформации становится проскальзывание по границам зерен. В работах [3,4] было показано, что в условиях внешней сдвиговой деформации зернограничное проскальзывание в

ГЦК-кристаллах может сопровождаться перестройкой атомной конфигурации в области дефекта, приводящей к перемещению границы зерен в направлении, перпендикулярном приложенной нагрузке. Было отмечено, что обнаруженный эффект наблюдается только при особых (специальных) условиях, а именно: низкая температура кристаллита, симметричные границы специального типа, сдвиговое нагружение, параллельное плоскости дефекта. Очевидно, что в реальных условиях поведение границы зерен в условиях сдвиговой деформации может существенно отличаться. Однако, несмотря на большую практическую значимость, этот вопрос по-прежнему остается малоизученным. Так, в работе [5] была обнаружена зависимость подвижности межзеренной границы от температуры кристалла, но не исследовались причины изменения скорости перемещения дефекта с ростом температуры. Поэтому цель данной работы — исследовать влияние температуры кристаллита, содержащего границу зерен специального типа, на особенности его пластического деформирования при сдвиговом нагружении и понять причины изменения подвижности межзеренной границы с ростом температуры.

Исследования проводились в рамках метода классической молекулярной динамики с использованием программного пакета LAMMPS [6]. Моделируемый образец представлял собой бикристалл меди, состоящий из двух зерен в форме прямоугольных фрагментов и содержащий плоский дефект структуры типа высокоугловой границы зерен $\Sigma = 5(210)[001]$. Для моделирования границы зерен специального типа использовался алгоритм, описанный в [7]. Суть подхода заключается в следующем. Зерно ориентируется в пространстве таким образом, чтобы внешние оси X , Y и Z соответствовали кристаллографическим направлениям $[210]$, $[\bar{1}20]$ и $[001]$ соответственно. Второе зерно является зеркальным отражением первого относительно плоскости XOZ , которая и становится плоскостью дефекта. Сдвиговая деформация образца моделировалась путем задания постоянных значений V_x компонент скоростей атомам, попадающим во внешние (по отношению к дефекту) приповерхностные слои. Модуль скорости движения атомов достигал 20 m/s , а ее направление отличалось для атомов из противоположных нагружаемых слоев. Таким образом, результирующая скорость сдвиговой деформации составляла 40 m/s . Толщина нагружаемых слоев соответствовала двум радиусам обрезания межатомного потенциала, который описывался в рамках метода

погруженного атома. Выбор потенциала обусловлен возможностью описывать с высокой точностью энергетические параметры дефектов структуры, упругие и поверхностные свойства моделируемого образца. Уравнения движения интегрировались с шагом по времени $\Delta t = 0.001$ ps. Полное число атомов в образце достигало 150 000. Вдоль плоскости границы зерен (направления X и Z) моделировались периодические граничные условия. Расстояние между нагружаемыми слоями и границей зерен составляло более 50 параметров решетки.

Моделируемый кристаллит исследовался в интервале температур от 0 до 1300 К. Для сравнения выполненная ранее оценка температуры плавления бездефектного кристаллита меди с тем же потенциалом взаимодействия показала значение ≈ 1350 К. Выбранная температура задавалась с использованием алгоритма масштабирования скоростей атомов исходя из равенства энергий

$$3/2NkT = \sum_i^N mV_i^2/2,$$

где i — номера атомов. В начальный момент времени задавалось случайное распределение скоростей атомов, а их корректировка проводилась в точках минимума потенциальной энергии. Моделируемый образец рассматривался как ансамбль NVE , в котором сохраняется число частиц N , занимаемый объем V и энергия системы E .

Результаты моделирования показали, что по характеру отклика моделируемого кристаллита на внешнюю сдвиговую нагрузку можно выделить три стадии. На первой стадии, при начальных температурах до ~ 500 К, поведение исследуемой границы зерен полностью идентично отмечаемому в работах [3,4]. А именно в условиях сдвиговой деформации наряду с относительным проскальзыванием взаимодействующих зерен наблюдается перемещение положения границы в направлении, перпендикулярном приложенному внешнему воздействию. Происходит достраивание атомных слоев одного из зерен за счет вовлечения атомов, контактирующих с плоскостью границы, исходно принадлежащих противоположному зерну. Скорость такого перемещения границы в указанном интервале температур остается приблизительно неизменной и в 1.5 раза превосходит относительную скорость смещения нагружаемых слоев. Результирующие смещения границы в направлении Y составляют

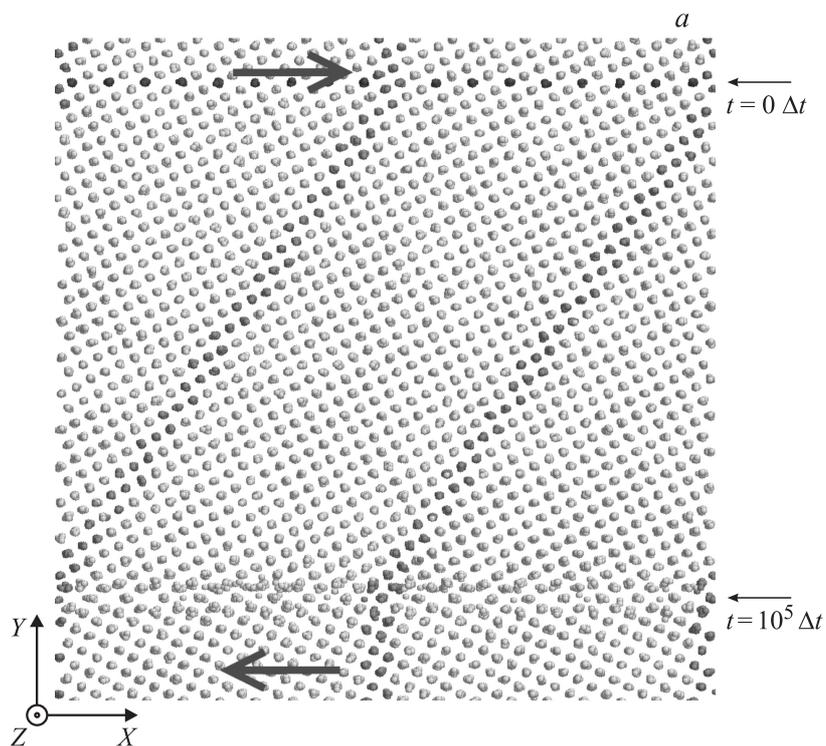


Рис. 1. Проекция на плоскость XOY структуры центрального фрагмента моделируемого образца, содержащего межзеренную границу при различных начальных значениях температуры: a — 500 К; b — 1000 К. Начальное и конечное положения границы отмечены как $t = 0\Delta t$ и $t = 10^5\Delta t$ соответственно. Стрелками показано направление нагрузки, прикладываемой к нагружаемым слоям. Темным цветом выделены атомы, исходно расположенные параллельно плоскости YOZ , для визуализации эффекта относительного смещения зерен.

10.43 и 10.38 nm в начале и в конце рассматриваемого интервала температур соответственно. Следует, однако, отметить, что с ростом температуры наблюдаются незначительные изменения структуры в плоскости дефекта, как показано на рис. 1, a , но это не отражается в целом на динамике процесса.

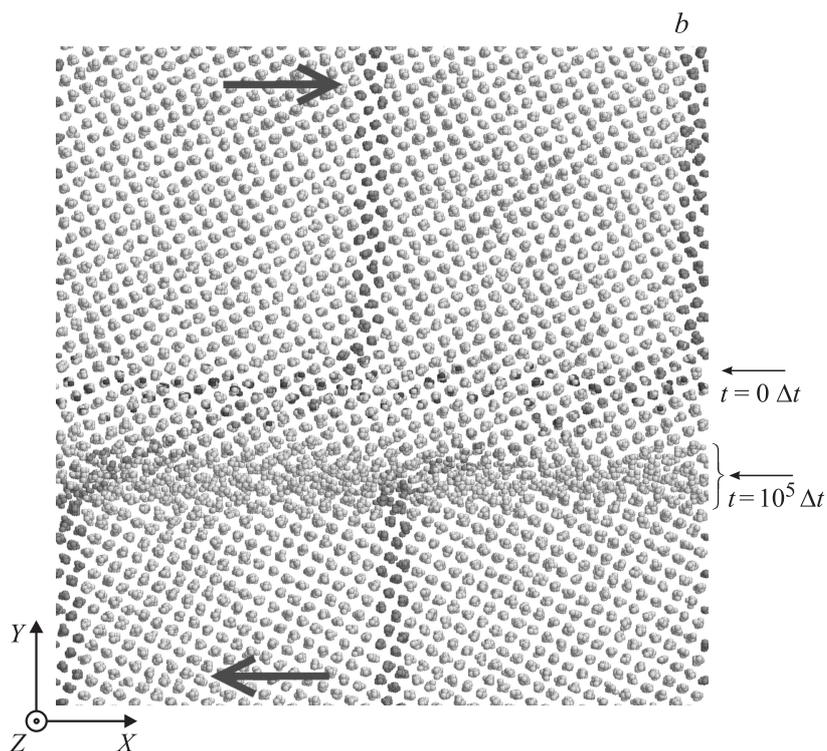


Рис. 1 (продолжение).

В диапазоне температур от ~ 500 до ~ 700 К можно выделить вторую стадию, когда скорость перемещения границы в направлении, перпендикулярном приложенному сдвиговому нагружению, а следовательно, и результирующая величина смещения границы зерен в направлении оси Y резко уменьшаются. Так, при температуре 600 К результирующее смещение плоского дефекта на том же временном интервале уменьшилось до 6.57 nm. А при повышении температуры до 700 К результирующее смещение границы составляет всего 4.21 nm. При этом рассчитанная скорость движения границы падает практически в 3 раза с 58 до 23 м/с. Это сопровождается увеличением ширины межзеренной границы, которое вызвано нарушением упорядоченной кристаллической структуры образца вблизи плоскости дефекта. На

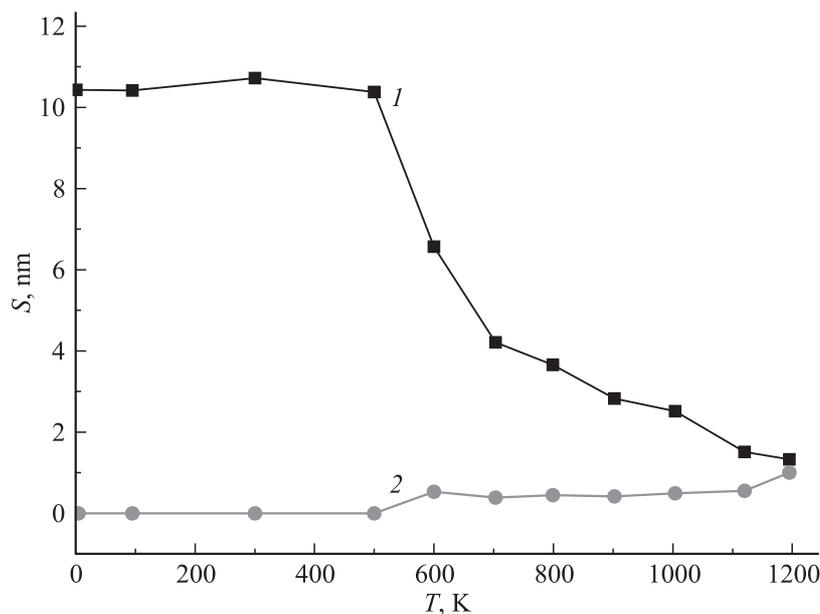


Рис. 2. Влияние температуры образца на результирующее смещение положения границы зерен вдоль оси Y за исследуемый интервал времени (1) и толщину слоя с нарушением регулярной упаковки атомов вблизи плоскости дефекта (2).

рис. 1, b отмечена область, прилегающая к плоскости дефекта, где наблюдается нарушение регулярности кристаллической решетки. При этом за координату дефекта Y принималась середина указанной области.

При температурах выше ~ 700 К динамика поведения границы меняется. Скорость изменения величины перемещения с ростом температуры уменьшается, а результирующее смещение положения дефекта в направлении оси Y за рассматриваемый интервал времени достигает минимума вблизи значения 1.3 nm. При этом ширина области, где наблюдается нарушение регулярности атомной решетки вблизи плоскости дефекта, на третьей стадии остается практически неизменной и составляет 0.5 nm. На рис. 2 показана зависимость общей величины сдвига и результирующей ширины границы от начальной

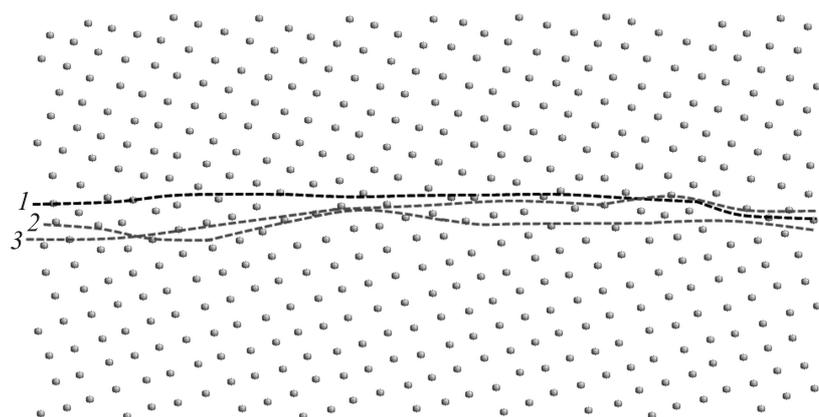


Рис. 3. Структура межзеренной границы в отдельно выбранном атомном слое, параллельном плоскости XOY . Пунктирными линиями отмечено положение границы зерен в выбранном слое (1) и в двух других атомных слоях (2, 3).

температуры моделируемого образца. Видно, что резкое уменьшение результирующего сдвига дефекта и уширение области межзеренной границы происходит в диапазоне температур образца $\approx 500\text{--}600\text{ К}$. Отметим, что указанные температуры соответствуют начальным значениям температуры образца и в ходе нагружения повышаются. Как показывают результаты моделирования, этими изменениями температуры можно пренебречь, так как оно составляет около 10 К для всех рассмотренных случаев. Дальнейший разогрев образца до температуры, близкой к температуре плавления, приводит к резкому увеличению ширины слоя разупорядочивания и падению величины смещения дефекта до нуля.

Послойный анализ результирующей атомной структуры моделируемого образца в плоскостях, расположенных параллельно плоскости XOY , показал, что даже при высоких температурах в каждом отдельном слое наблюдаются лишь незначительные нарушения атомного порядка вблизи линии границы зерен. Можно однозначно выделить структуру каждого из зерен и межзеренную границу. Однако форма самой границы при этом не является прямой. Таким образом, видимое нарушение регулярности упаковки атомной решетки в области

моделируемого дефекта (рис. 1, *b*) объясняется рассогласованием положения линии границы в различных атомных слоях, перпендикулярных направлению Z . Отметим, что аналогичный результат отмечался в работе [4], где исследовались особенности поведения границ зерен с неидеальной структурой в условиях сдвиговой деформации. Рассогласование положения межзеренной границы в различных атомных слоях хорошо видно на рис. 3, где показана структура одного из выделенных атомных слоев, параллельного плоскости XOY , а пунктирной линией 1 отмечено положение границы в этом слое. Положение линии границы зерен в двух других атомных слоях отмечено пунктирными линиями 2 и 3. Видно, что на отдельных участках расхождение положения границы зерен может превосходить размер параметра решетки.

Исследование атомной структуры материала вблизи межзеренной границы показало, что при высоких температурах доля механизма зернограничного проскальзывания, сопровождаемого перпендикулярным перемещением границы зерен, снижается. Следствием этого является доминирование механизма относительного проскальзывания зерен вдоль границы раздела, реализуемого преимущественно посредством тасования атомов (*atomic shuffling*) [8]. Таким образом, выявленная стадийность отклика моделируемого кристаллита на внешнюю сдвиговую нагрузку в широком диапазоне температур может быть связана с проявлением различных механизмов зернограничного проскальзывания для рассмотренного типа плоских дефектов, а переходная стадия объясняется сменой этих механизмов. В качестве критерия переключения может выступать степень рассогласования атомной структуры в области границы зерен, оцениваемая, например, с помощью вычисления структурного фактора или построения пространственного распределения атомов с решеткой, отличной от идеальной ГЦК-структуры. Причинами нарушения регулярной упаковки атомов в области границы зерен могут являться изменение температурного фона или иное внешнее воздействие, а также изменение параметра решетки вследствие ее теплового расширения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 12-08-00960а.

Список литературы

- [1] Поздняков В.А., Глезер А.М. // ФТТ. 2005. Т. 47. В. 5. С. 793–800.
- [2] Гуткин М.Ю., Микаелян К.Н., Овидько И.А. // ФТТ. 2008. Т. 50. В. 7. С. 1216–1229.
- [3] Дмитриев А.И., Никонов А.Ю., Псахье С.Г. // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. В. 17. С. 16–22.
- [4] Dmitriev A.I., Nikonov A.Yu., Psakhie S.G. // Physical Mesomechanics. 2011. V. 14. N 1–2. P. 24–31.
- [5] Cahn John W., Mishin Y., Suzuki A. // Acta Materialia. 2006. V. 54. Iss. 19. P. 4953–4975.
- [6] Plimpton S.J. // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. N 1. P. 1–19.
- [7] Suzuki A., Mishin Y. // Interface Sci. 2003. V. 11. N 1. P. 131–148.
- [8] Sasoz F., Molinary J.F. // Acta Materialia. 2005. V. 53. N 7. P. 1931–1944.