

01:05

Изучение атомной структуры ОЦК и ГЦК кристаллов при мгновенной пластической деформации

© А.И. Лобастов, В.Е. Шудегов, В.Г. Чудинов

Физико-технический институт УрО РАН,
426001 Ижевск, Россия
Удмуртский государственный университет,
426034 Ижевск, Россия

(Поступило в Редакцию 20 января 1997 г.)

Работа посвящена исследованию эволюции атомной структуры гранецентрированных (ГЦК) и объемно-центрированных кристаллов (ОЦК) в условиях импульсных внешних нагрузок и больших пластических деформаций на основе компьютерных экспериментов. Деформацию кристаллов осуществляли поэтапно до 32%. После каждого этапа деформации (2%) систему релаксировали методом молекулярной динамики к новому равновесному состоянию при температуре 300 К. Результаты компьютерных экспериментов показали, что при мгновенных внешних нагрузках пластическая деформация в зависимости от ее стадии может протекать либо за счет движения частичных дислокаций, либо за счет двойникования, либо путем разворота и сдвига атомных плоскостей. Найдены закономерности изменения потенциальной энергии системы и угла разворота атомных плоскостей в зависимости от величины пластической деформации кристалла.

Введение

Хорошо известно, что при определенных условиях (например, высокие скорости деформации или низкие температуры) преимущественным способом пластической деформации является двойникование [1,2]. Такие двойники в кубических кристаллах, как правило, образуются в результате движения через кристалл набора двойнивающих дислокаций [3]. В последнее время благодаря быстродействующим ЭВМ появилась возможность изучения атомарных механизмов больших пластических деформаций модельных кристаллов на основе компьютерных экспериментов [см., например, 3,4]. Это обстоятельство позволило непосредственно увидеть закономерности фрагментации монокристаллов, процессы зарождения дефектов и их эволюцию, ротационные механизмы пластичности. Данная работа посвящена исследованию атомной структуры ГЦК и ОЦК кристаллов при мгновенной пластической деформации на основе компьютерного моделирования.

Методика расчетов

Компьютерные эксперименты по деформации были выполнены при циклических граничных условиях. В исходном (недеформированном) состоянии кристаллы имели форму куба с ОЦК и ГЦК решеткой. Общее количество атомов составляло 1024 для ОЦК и 1372 для ГЦК кристаллов. Деформацию ε осуществляли поэтапно до 32%. На каждом этапе кристалл сжимали на 2% по направлению [001], а по направлениям [100] и [010] растягивали так, чтобы объем его оставался постоянным.

Межатомное взаимодействие описывали псевдопотенциалом Fe–Fe, рассчитанным по схеме Хейне–Абаренкова–Анималу с функцией экранировки Шоу [5].

После каждого этапа деформирования систему релаксировали с использованием программы метода молекулярной динамики [6,7] к новому равновесному состоянию при температуре 300 К. В процессе проведения компьютерных экспериментов осуществляли непрерывный контроль за функцией радиального распределения атомов (ФРРА), температурой, энергией системы, расположением атомов в различных плоскостях и др. параметрами.

Результаты и их обсуждение

Первые сдвиги плоскостей для ОЦК наблюдали при $\varepsilon = 8\%$. Указанная деформация соответствует уменьшению размера монокристалла вдоль направления [001] на $a/2$, где a — параметр решетки. Такие сдвиги, как показано на рис. 1, приводят к симметричному расположению атомов относительно плоскости (010).

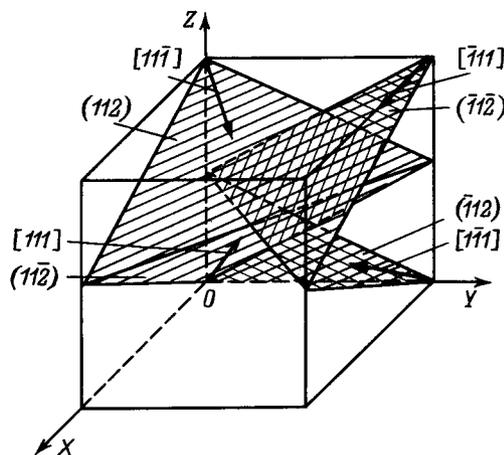


Рис. 1. Сдвиг плоскостей в ОЦК кристалле при $\varepsilon = 8\%$.

Одновременное движение плоскостей по четырем пространственным диагоналям куба в указанных направлениях позволяет атомам заполнить свободный объем, а сложение векторов перемещения на каждый сдвигающийся ряд в плоскостях (001) дает представление о характере движения атомов на данном этапе. При этом образуется кристаллическая структура, пространственное расположение атомов в которой в направлении [001] повторяется через одну плоскость (рис. 2). При этом в плоскостях (011) и (011) атомы также располагаются симметрично, образуя плоскость симметрии. Указанное обстоятельство хорошо видно из рис. 3.

В дальнейшем, при деформации до $\epsilon = 16\%$ плоскость симметрии преобразуется в межзеренную границу, состоящую из краевых дислокаций противоположного знака с векторами Бюргерса $a/2[111]$ (рис. 4).

После очередного шага по деформации дислокации начинают попарно аннигилировать. При деформации

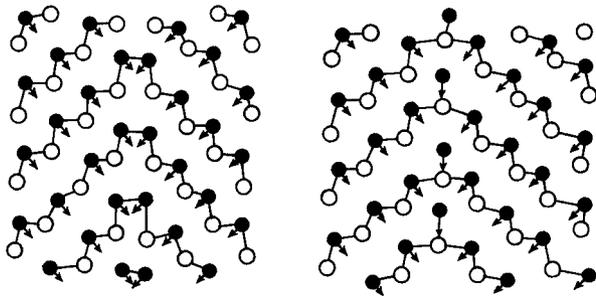


Рис. 2. Чередование расположения атомов в двух соседних плоскостях ОЦК кристалла вдоль направления [001]. Деформация $\epsilon = 8\%$. ● — атомы, которые испытывают сдвиг; ○ — атомы, которые остаются в прежних положениях.

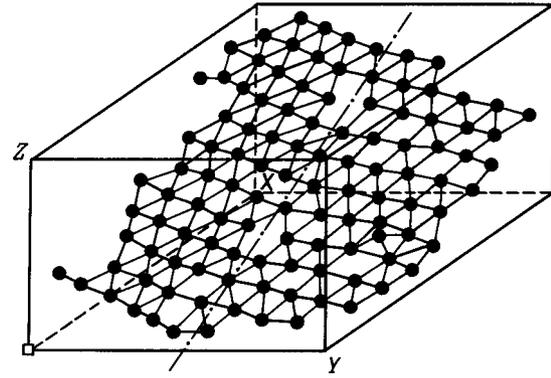


Рис. 4. Схема расположения атомов в плоскости (112) ОЦК кристалла при $\epsilon = 16\%$. Пунктиром обозначена межзеренная граница. Толщина слоя 1 \AA .

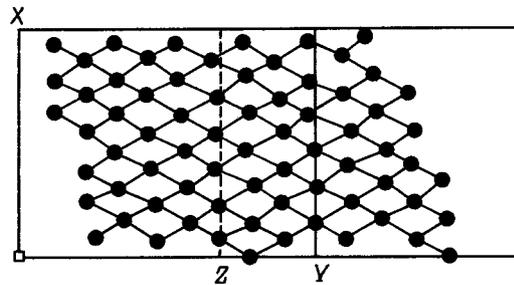


Рис. 5. Схема расположения атомов в плоскости типа (001) развернутой на угол α вследствие деформации $\epsilon = 22\%$. Толщина слоя 1 \AA .

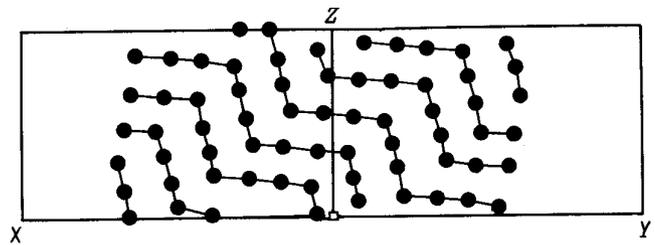


Рис. 6. Двойниковая структура, образовавшаяся после деформации $\epsilon \sim 20\%$ у объекта с ГЦК решеткой. Расположение атомов в плоскости (001) в слое толщиной 1 \AA .

$\epsilon = 22\%$ решетка полностью восстанавливается, но при этом плоскости (001) оказываются развернутыми относительно оси деформации на угол α по отношению к исходной системе отсчета (рис. 5).

Анализ пространственного расположения атомов показал, что дальнейшая деформация до $\epsilon = 32\%$ сопровождалась разворотом объекта. Например, плоскость, представленная на рис. 6, разворачивалась за счет ротационных механизмов деформации согласно данным, приведенным в таблице.

В случае ГЦК кристаллов анализ расположения атомов показывает, что сдвиги плоскостей типа (111) отно-

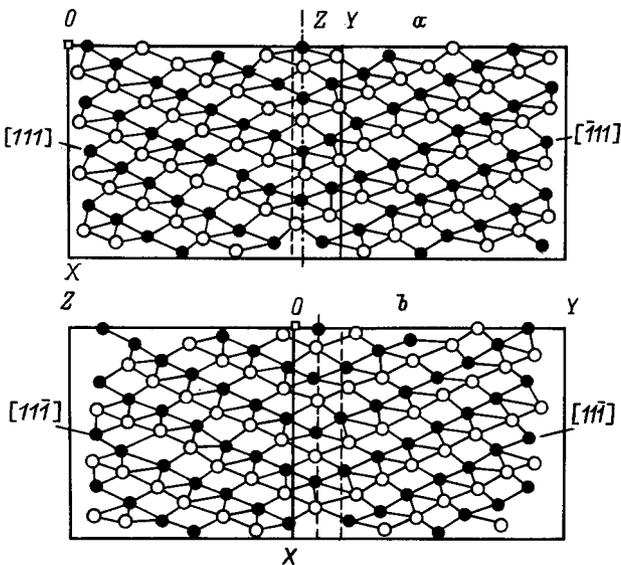


Рис. 3. Симметричное расположение атомов в плоскостях (011) (a) и (011) (b) ОЦК кристалла при деформации $\epsilon = 8\%$. Пунктиром показана плоскость симметрии.

Угол поворота от степени деформации для плоскости, представленной на рис. 5

ε , %	α , grad
22	0
24	0.7202
26	7.1357
28	2.2423
30	3.7840
32	1.3974

сительно друг друга происходят начиная с деформации $\varepsilon \sim 10\%$ за счет движения частичных дислокаций $a/6[11\bar{2}]$. Это обстоятельство приводит к сдвиговой деформации одной части кристалла относительно другой и к снятию локальных напряжений, возникающих в процессе деформации. При этом границами между правильными фрагментами служат дефекты упаковки. Дальнейшая деформация ГЦК кристаллов приводит к очередным сдвигам плоскостей типа (111), что служит причиной образования и роста двойников (рис. 6). Такие двойники растут пропорционально степени деформации и в конечном итоге занимают весь объем кристалла. В результате образуется решетка, которая имеет двойниковую ориентацию по отношению к оси деформации. Кроме того, в ходе такого процесса происходят трансформация, разворот и деформация плоскостей по отношению к первоначальному положению.

Следует отметить, что во всех проведенных нами компьютерных экспериментах зависимость потенциальной энергии от степени деформации носит сложный характер. На любом участке кривой при поэтапном деформировании без образования кристаллических дефектов потенциальная энергия линейно возрастает в зависимости от степени деформации; в случае, когда образуются дефекты кристаллической решетки, потенциальная энергия кристалла понижается на величину $\Delta E = \sum_i E_i$ (где E_i — энергия образования дефекта). При аннигиляции дислокаций, а также при повороте плоскостей потенциальная энергия плавно понижается, при деформации $\varepsilon = 32\%$ потенциальная энергия уменьшается практически до первоначального значения. Важно указать, что, хотя кристаллическая решетка в процессе деформации сильно искажена, функция радиального распределения атомов при этом остается типичной для ОЦК и ГЦК кристаллов. Что касается атомарных механизмов деформации, то в случае ОЦК и ГЦК кристаллов они существенно отличаются. Так, если деформация у ГЦК кристаллов протекала в основном за счет двойникования, то в ОЦК решетке схожая с двойником структура наблюдалась только на начальной стадии. Деформация ОЦК кристалла в нашем случае происходила за счет движения плоскостей типа (112), что впоследствии приводило к образованию дислокационной межзеренной границы, в то время как у ГЦК кристаллов границами между правильными фрагментами служили дефекты упаковки.

Таким образом, анализ полученных результатов показывает, что компьютерные эксперименты действительно могут служить эффективным средством исследования процессов структурных превращений при интенсивных деформациях.

Список литературы

- [1] Бернштейн М.Л., Займовский В.А. Механические свойства металлов. М.: Металлургия, 1979. 495 с.
- [2] Финкель В.М., Федоров В.А., Королев А.П. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании. Ростов-на-Дону, 1990. 176 с.
- [3] Шудегов В.Е., Журавлев В.А., Лихачев В.А. и др. // Физика и механика новых материалов. Ижевск, 1992. С. 4–13.
- [4] Шудегов В.Е., Журавлев В.А., Лихачев В.А. и др. // Физика и химия стекла. 1993. Т. 19. С. 473–481.
- [5] Долгушева Е.Б., Чудинов В.Г., Шудегов В.Е. // Вестник Удмуртского университета. 1993. Т. 2. Вып. 5. С. 40–50.
- [6] Чудинов В.Г., Долгушева Е.Б., Юрьев А.А. Сверхпроводимость: физика, химия, техника. 1991. 23 с.
- [7] Дядин В.М., Чудинов В.Г., Гондырева Л.И., Бычков Д.А. Деп. в ВИНТИ. № 1537-В-91. М., 1991. 23 с.