

01;05

Атомные механизмы развития микротрещины в чистых ГЦК и ОЦК металлах и с примесью водорода

© М.А. Баранов, А.Ю. Дроздов, В.Г. Чудинов, В.Я. Баянкин

Физико-технический институт УрО РАН,
426001 Ижевск, Россия

(Поступило в Редакцию 11 января 1999 г.)

Методом молекулярной динамики (ММД) с использованием потенциалов парного взаимодействия (ППВ), рассчитанных в рамках теории псевдопотенциала в приближении Хейне–Аборенкова–Анималу, смоделировано развитие трещины в чистых и с примесью водорода алюминии и α -железе при нагрузках заведомо больше критических. Показано, что в чистых металлах распространение трещин не происходит. Они затупляются, их основание уширяется, а внутренние напряжения снимаются за счет возникновения дислокаций различного типа и "шейки" напротив трещины, т. е. реализуются механизмы типичного вязкого разрушения. При наличии примеси водорода ситуация существенно иная. В алюминии происходит его десорбция и материал сохраняет свои пластические свойства. В α -железе водород образует вблизи зарождающихся дислокаций облака Коттрелла и блокирует дальнейшее расползание и образование новых дислокаций. Кроме того, увеличение концентрации водорода вблизи устья трещины в железе инициирует тенденцию к протеканию фазового $\alpha \rightarrow \gamma$ перехода. В результате этого наблюдается распространение трещины, т. е. охрупчивание материала.

Введение

Определяющее влияние микротрещин или трещиноподобных дефектов на процесс разрушения высокопрочных материалов было показано еще в 20-е годы [1]. Дальнейшее изучение процессов разрушения привело к созданию нового научного направления — механика разрушения. Несмотря на большие достижения в этой области (особенно экспериментальные), в настоящее время не существует единого механизма в описании развития трещины. Например, в рамках континуального приближения [2] пороговое напряжение распространения трещины достигает величин, которые превышают их теоретическую прочность ($\sim 0.1\mu$, где μ — модуль сдвига). В то время как реальные величины на несколько порядков меньше, особенно остро стоит вопрос о хрупком разрушении металлов и сплавов, в которых возможна релаксация напряжений вблизи устья трещины за счет механизмов возникновения дефектов различного типа. Большинство специалистов считают, что решающую роль в этом случае играют примеси, но поведение и роль их оценивают по-разному. Существует также мнение, что хрупкость — свойство решетки определенного типа, например объемно-центрированного кристалла (ОЦК). Для того чтобы подтвердить или опровергнуть ту или иную модель, необходимо рассмотрение проблемы на атомарном уровне. Естественно, что силы межатомного взаимодействия должны быть максимально близкими к реальным.

С появлением мощных ЭВМ оказалось возможным приступить к решению этой задачи, используя метод молекулярной динамики (ММД), хотя только на качественном уровне [3]. К сожалению, работы, выполненные ранее, имеют существенные недостатки, отметим только основные. Во-первых, в них моделировались, как правило, двумерные решетки [3] или квазитрехмерные

решетки [4]. Но хорошо известно, свойства двумерных материалов кардинально отличаются от трехмерных, хотя бы потому, что в них в принципе не могут зародиться двумерные дефекты. Во-вторых, обычно использовались простейшие потенциалы парного взаимодействия (ППВ) в форме Ленарда–Джонса или Морзе. Это означает, что используется приближение упругих сфер и устойчивыми в процессе моделирования могут быть только структуры с плотнейшей упаковкой — гранцентрированной кубической (ГЦК) и гексагональной плотноупакованной (ГПУ). При моделировании других структур могут быть получены ложные результаты. В-третьих, структурные перестройки — это медленные по атомным масштабам процессы и, на наш взгляд, обычно в модельных расчетах не завершались из-за ограниченных возможностей ЭВМ более ранних поколений и использования не оптимизированных по затратам машинного времени алгоритмов ММД. Кроме того, существует и проблема корректного описания ППВ металл–неметаллическая примесь [4].

Известно множество моделей влияния примесей на охрупчивание металлов и сплавов. В качестве примера перечислим только модели водородного охрупчивания [5], связанные с 1) газообразными продуктами, образующимися внутри металла при реакции диффундирующего водорода с примесями или легирующими элементами; 2) молекулярным водородом в несплошностях; 3) хрупкими продуктами превращения, образовавшимися при взаимодействии металлов с водородом; 4) растворенным водородом; 5) продуктами распада нестабильных относительно водорода растворов под длительным воздействием приложенных напряжений; 6) диффузионно-подвижным, растворенным водородом; 7) внешним водородом; 8) водой на поверхности образца; 9) блокированием исходной дислокационной структурой облаками Коттрелла.

В данной работе предпринята попытка смоделировать методом молекулярной динамики процесс разрушения при одноосном растяжении в чистых трехмерных материалах — алюминии с ГЦК решеткой и α -железе с ОЦК решеткой, а также особенности их поведения при наличии примесей водорода. В первом случае предполагалось выяснить роль типа кристаллической решетки, а во втором — установить механизм водородного охрупчивания. Известно, что подобный тип охрупчивания ярко выражен в α -железе, а в алюминии практически отсутствует [6]. Атомные механизмы зарождения трещин в данной работе не рассматриваются. Причем они могут быть любыми: скопление дислокаций с небольшим пластическим сдвигом, пересечение двойниковых пластин, образование полигенизационных трещин, слияние параллельных линий скольжения и т. д.

Методы исследования

Компьютерный эксперимент проводился с использованием программы MMDYN, основанной на применении ММД. Движение атомов описывалось системой обычных уравнений Ньютона, которая решается численно методом Эйлера II порядка. Отвод энергии от системы осуществляется введением вязких сил. Алгоритм оптимизировался по затратам машинного времени и описан в работе [7]. Начальная конфигурация атомов кристаллита представляла собой трехмерную пленку (001) толщиной 24 атомных слоя для α -железа и 18 атомных слоев для алюминия. Поверхность (001) являлась свободной, а на поверхности (100) и (010) накладывались циклические граничные условия. Размеры кристаллита вдоль направлений [100] и [010] равнялись 20 атомным слоям. Таким образом, в каждом машинном эксперименте рассчитывалась система из приблизительно 3000 атомов. Трещина моделировалась путем удаления части атомов из двух соседних плоскостей типа (010). Глубина трещины во всех случаях выбиралась равной 9 атомным слоям. Для изучения дальнейшего поведения системы к пленке прикладывались одноосные растягивающие напряжения в направлении [100] существенно выше критических. Отвод энергии был подобран таким образом, чтобы кинетическая энергия оставалась неизменной при всех нагрузках (~ 300 К). К сожалению, из-за больших по масштабам ЭВМ времен диффузии водорода к устью трещины нам не удалось смоделировать этот процесс. Наблюдалась только тенденция этого процесса, при этом мы смогли смоделировать только конечную стадию процесса. Водород вводился в октаэдрические поры в достаточно большом количестве ~ 5 –7%. В связи с этим следует говорить только о качественном, а не о количественном соответствии с известными моделями и экспериментами. Необходимо отметить, что не существует единого мнения о валентном состоянии водорода в металлах. Различными исследователями высказывались самые различные мнения, что она может быть и +1, и 0, и -1. Выполненные нами расчеты показали, что

реальные ППВ металл–водород реализуются только при валентности $+1e^+$ (рис. 1). Соответствующие валентности Fe и Al — $+3e$.

Алюминий и алюминий с водородом

Хорошо известно, что алюминий — пластичный материал, а водород практически в нем не растворяется. Если он вводится методом имплантации или в процессе электролиза, то образует газовые пузыри, главным образом на границах зерен [8]. Высказывалось также предположение, что существенную роль может играть оксидная пленка. Физически реальные ППВ Al–H были получены только при использовании валентности водорода $+1e$. На рис. 1 представлены эти потенциалы. Оказалось, что иону водорода энергетически невыгодно располагаться ни в положении замещения, ни в тетра- и октаэдрических порах.

На рис. 2 представлены последовательные этапы эволюции ($\tau_{\max} = 10^{-11}$ s) с одной из центральных плос-

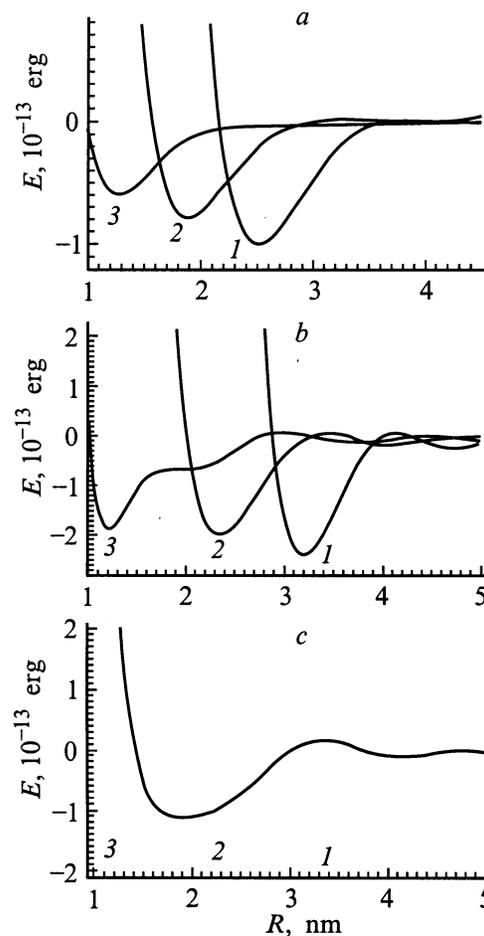


Рис. 1. Потенциалы парного взаимодействия: *a* — в ГЦК алюминии с примесью водорода (1 — Al–Al, 2 — Al–H, 3 — H–H); *b* — в ОЦК железе с примесью водорода (1 — Fe–Fe, 2 — Fe–H, 3 — H–H); *c* — в чистом ОЦК железе (Fe–Fe).

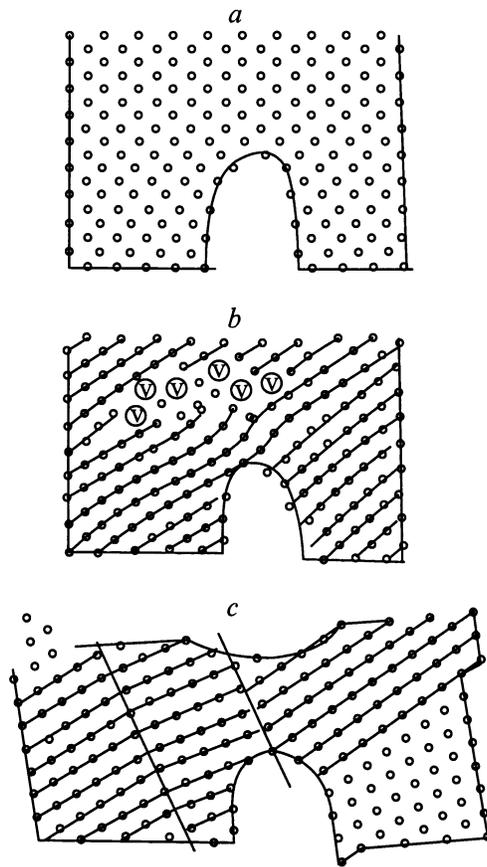


Рис. 2. Последовательные этапы эволюции центральной плоскости кристаллита (001) из чистого алюминия: *a* — исходное состояние, деформации нет; *b* — деформация 10%; *c* — деформация 30%.

костей типа (100) алюминия при растяжении пленки на $\sim 30\%$. На начальном этапе наблюдалась релаксация за счет образования дислокаций с самыми различными векторами Бюргера. Хорошо видны две частичные дислокации Франка с вектором Бюргера типа $a/3 \langle 111 \rangle$, образующие дислокационный диполь, четыре частичные дислокации Шокли с вектором Бюргера типа $a/6 \langle 112 \rangle$, образующие два дислокационных диполя, и две полные типа $a/2 \langle 110 \rangle$ дислокации, имеющие обрыв на поверхности трещины. Как известно, полные дислокации энергетически невыгодны и их появление в данном случае, вероятно, связано с наличием трещины, о чем свидетельствует положение данных дислокаций. Наличие представленных дислокаций подтверждено анализом других плоскостей, параллельных данной. В результате произошла диффузионная перестройка структуры. Плоскости типа (100) развернулись на $\sim 10\text{--}15^\circ$ и сформировались двойники (рис. 2, *c*), кроме того, образовалась "шейка", т.е. реализуется типичный случай вязкого разрушения с пластической деформацией в устье трещины по дислокационному механизму. Сама трещина затупляется, уширяется, но не распространяется.

При добавлении в решетку алюминия примеси водорода ситуация по существу изменяется мало, поскольку последний начинает немедленно покидать матрицу через свободные границы. Мы не наблюдали даже образования облаков Коттрелла на дислокациях. Очевидно, что в реальной ситуации будут образовываться флокены либо на границах, либо в теле матрицы, но наши технические возможности не позволяют смоделировать эти процессы до их завершения.

Железо и железо с водородом

В чистом α -Fe также не происходит распространения трещины в глубину пленки. Как и в алюминии устье трещины закругляется, а ее длина уменьшается, что, естественно, должно приводить к уменьшению концентрации напряжений [9]. На рис. 3 показано перемещение некоторых конкретных атомов из плоскости типа (100), параллельной трещине, в соседнюю, в которой изначально и располагалась трещина. Видно, что атомы поверхности, расположенные вблизи вершины трещины, вовлекаются внутрь кристаллита. Перемещение происходит не атомными рядами, а их отдельными фрагментами. Например, видно перемещение фрагмента ряда, состоящего из четырех атомов (с учетом циклических граничных условий), что приводит в итоге к появлению на месте бывшей трещины кристаллической области, обогащенной вакансиями. Фактически происходит "самозалечивание" трещины. Такой результат противоречит результатам подобных расчетов, проделанных авторами [3], которые сделали вывод о том, что хрупкость свойственна ОЦК решетке, во всяком случае для ОЦК структуры в двухмерном случае. Причина расхождения, по нашему мнению, заключается: во-первых, в том, что они моделировали двумерную решетку, и, во-вторых, использовали ППВ, не обеспечивающие устойчивость кристаллической решетки. При моделировании чистого α -Fe ситуация в общих чертах мало отличается от ситуации в чистом Al. Однако при наличии примеси водорода картина совершенно иная.

На рис. 3 представлены результаты моделирования в системе Fe + H. Известно, что уже примесь в сотые доли процента водорода приводит к водородному охрупчиванию железа, но это происходит за чрезвычайно большие по масштабам нашего моделирования времена (~ 100 h и более). При этом наблюдается преимущественная диффузия атомов водорода к устью трещины [8]. Поэтому мы смогли смоделировать только заключительную стадию процесса при достаточно высокой концентрации водорода ($\sim 7\%$). В этом случае трещина на затуплялась, легко удлинялась, шейка не образовывалась, разворота кристалла не было. Однако наблюдавшийся атомный механизм ранее не был предсказан. Оказалось, что в результате введения водорода изменилась плотность свободных электронов и, следовательно, экранирование между атомами матрицы железа. Это привело к

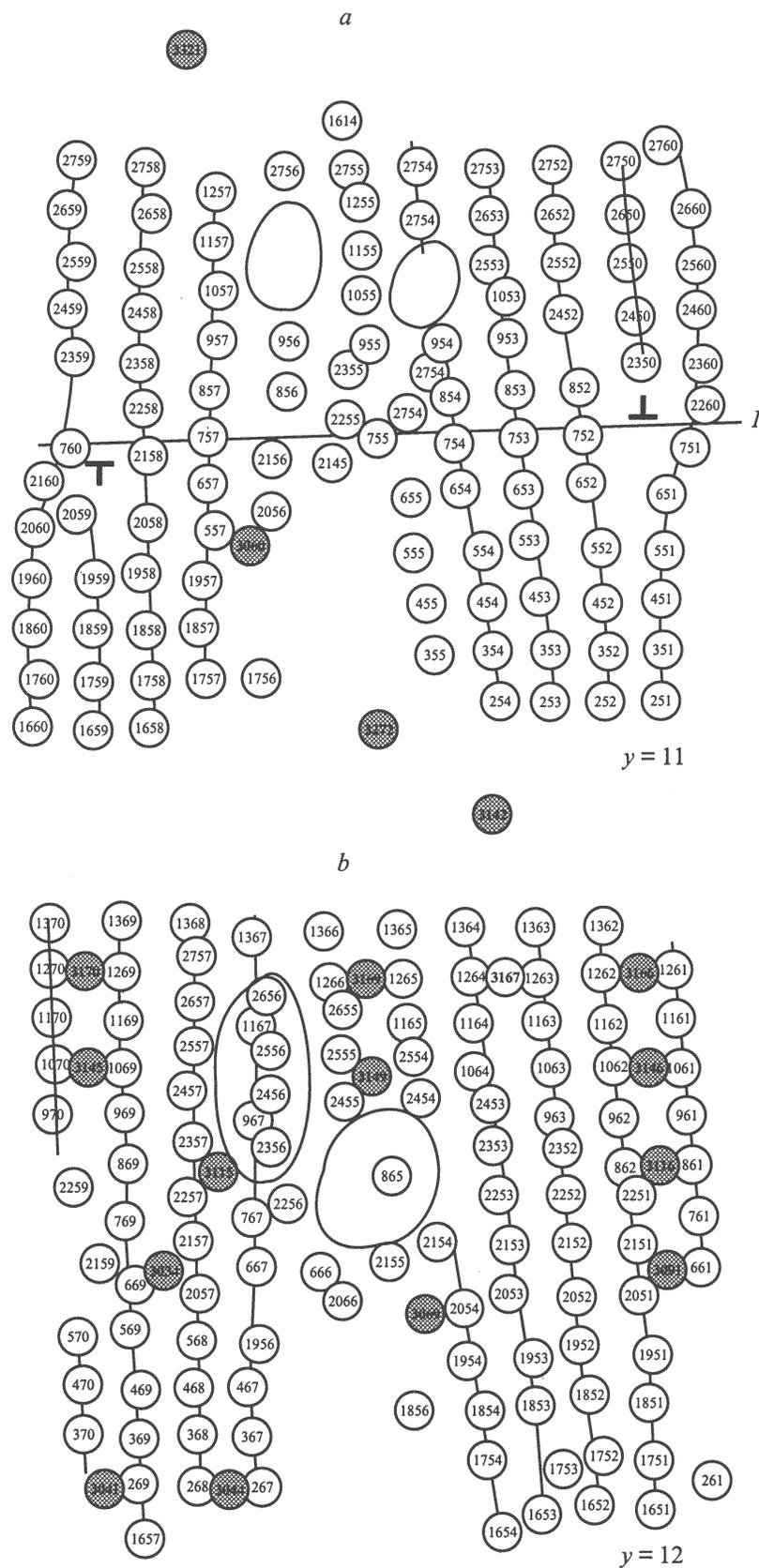


Рис. 3. Промежуточная атомная структура трех соседних плоскостей вблизи устья трещины α -Fe-H: *I* — линия сдвига; *a-d* — центральные соседние плоскости типа (100).

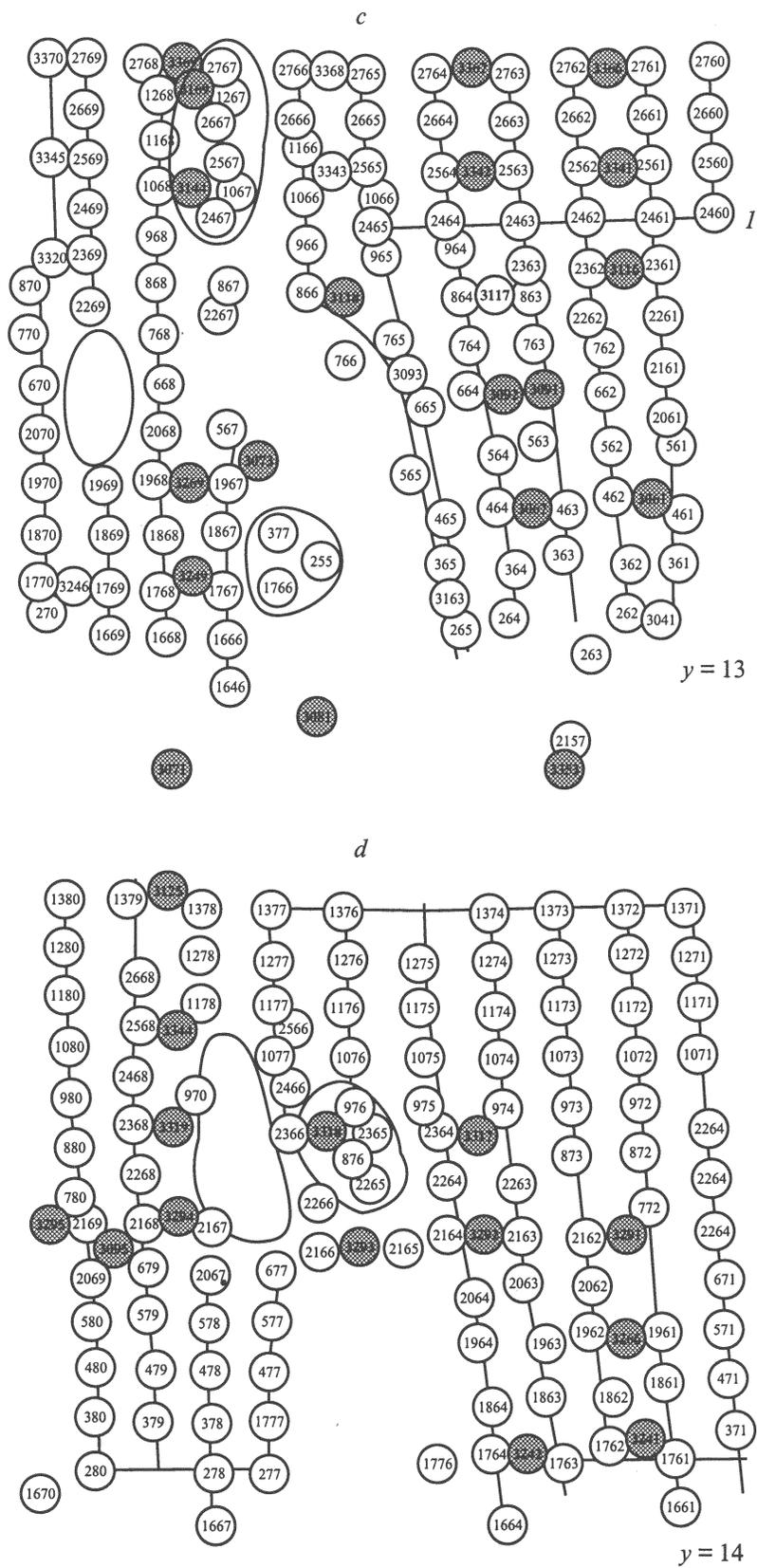


Рис. 3 (продолжение).

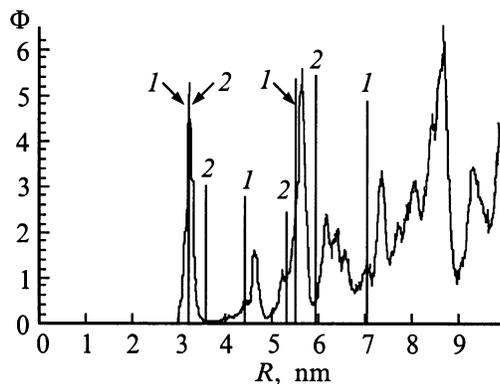


Рис. 4. Функция радиального распределения плотности α -Fe. Конечная структура $\tau = 0.8 \cdot 10^{-11}$ с; 1 — ГЦК, 2 — ОЦК.

ОЦК \rightarrow ГЦК фазовому переходу. Особенно интенсивно он происходит в устье трещины. На рис. 4 представлены функции радиального распределения атомов (ФРРА). Видно, что на заключительном этапе моделирования система состоит из трех фаз: остаточной ОЦК, ГЦК и аморфной. Пластической деформации за счет образования дислокаций не наблюдалось.

Заключение

Таким образом, моделирование трехмерных систем с ГЦК и ОЦК структурами показало, что решающую роль при охрупчивании играют особенности сил межатомного взаимодействия. Чистые алюминий и железо не охрупчиваются. При наличии примеси ситуация может быть различной. Если происходит ее концентрация в устье трещины, то возможен локальный фазовый переход и распространение трещины, т.е. охрупчивание. Если примесь дегазируется, то материал остается пластичным.

Работа выполняется по программе "Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки на 1997–2000 гг." (проект № КО 422).

Список литературы

- [1] Смиян О.Д. // Журн. физ. химии. 1980. Т. LIV. № 11. С. 2913–2917.
- [2] Малкин В.И., Кальнер Б.Д., Орлов Л.Г., Берикашвили Т.И. Сб. ЦНИИЧМ. Проблемы металловедения и физики металлов. № 6. М.: Металлургия, 1980. 104 с.
- [3] De Celis D., Argon A.S., Yip S. // J. Appl. Phys. 1983. Vol. 54. N 9. P. 4864–4878.
- [4] Кирсанов В.В., Туркбаев Т.Э., Темиралиева Г.Т., Пятилетов Ю.С. // Моделирование на ЭВМ процессов радиационных и других воздействий в кристаллах. Л.: Изд-во ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 1989. 205 с.
- [5] Походня И.К., Швачко В.И., Упырь В.Н. Вторичная ионная и ионно-фотонная эмиссия. 1988. № 2. С. 30–31.
- [6] Колачев Б.А. Водородная хрупкость металлов. М.: Металлургия, 1985. С. 51.

- [7] Дядин В.М., Чудинов В.Г., Гондырева и др. Деп. в ВИНТИ. № 1537-В91. 1991. 23 с.
- [8] Вайнман А.Б., Мелехов Р.К., Смиян О.Д. Водородное охрупчивание элементов котлов высокого давления. Киев: Наукова думка, 1990. 272 с.
- [9] Гуляев А.П. Металловедение. М.: Металлургия, 1986. 544 с.