

01;05

## Пластическая деформация монокристаллов алюминия в компьютерном эксперименте

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

Удмуртский государственный университет,  
426034 Ижевск, Россия

(Поступило в Редакцию 15 июля 1998 г.)

Выполнены две серии компьютерных экспериментов по исследованию эволюции атомной структуры монокристаллов алюминия в условиях импульсных внешних нагрузок и больших пластических деформаций. В первом случае межатомное взаимодействие описывали псевдопотенциалом, а во втором — эмпирическим потенциалом. Деформацию осуществляли поэтапно, так что после каждого этапа деформации (2%) систему релаксировали методом молекулярной динамики к новому равновесному состоянию при температуре 300 К. Конечная деформация кристалла составляла 70%. Результаты компьютерных экспериментов показали, что, несмотря на различие особенностей пластического поведения алюминия при использовании различных потенциалов, деформационный процесс в обоих случаях преимущественно протекает по двойниковому механизму. Причем смена механизма или схемы пластической деформации в данных экспериментах зависит не только от сил межатомного взаимодействия и размера кристалла, но и от степени дефектности исследуемого объекта.

### Введение

Известно, что пластическая деформация твердых тел осуществляется за счет дефектов различной природы. Несмотря на существование прямых методов наблюдения дислокаций и других элементарных носителей деформационных процессов, вопрос о механизмах пластической деформации, в частности в условиях ударного воздействия при больших пластических деформациях, до сих пор остается до конца не выясненным. В этих случаях необходимая информация может быть получена при математическом моделировании соответствующих процессов на ЭВМ. В последнее время компьютерное моделирование стало эффективным методом исследования пластической деформации и ее механизмов. Так, в работе [1] в рамках квазитрехмерной квазистатической модели проведен компьютерный эксперимент по изучению механизмов перехода однородно деформированного кристалла аргона от бездефектного состояния к состоянию с дефектами. В работах [2,3] методом молекулярной динамики исследовалось поведение монокристаллов  $\alpha$  и  $\gamma$ -Fe при мгновенной пластической деформации. Такой подход позволил непосредственно увидеть процессы зарождения дефектов их трансформации. Данная работа является продолжением [2] и посвящена изучению эволюции структуры при пластической деформации градиентированных кристаллов (ГЦК) в зависимости от потенциалов межатомного взаимодействия.

### Методика расчетов

Для проведения компьютерных экспериментов были сформированы монокристаллы алюминия с ГЦК решеткой в форме куба, состоящие из 2048 атомов. Деформацию  $\varepsilon$  осуществляли поэтапно с использованием цикли-

ческих граничных условий при температуре  $T = 300$  К. На каждом этапе монокристалл алюминия сжимали на 2% по оси OZ (деформация  $\varepsilon_{zz}$  отрицательна), а по осям OX и OY растягивали так, чтобы объем его оставался постоянным (деформации  $\varepsilon_{xx}$  и  $\varepsilon_{yy}$  положительны). Проведены две серии компьютерных экспериментов. В первом случае межатомное взаимодействие описывали псевдопотенциалом, рассчитанным по схеме Хейне–Абаренкова–Анималу [14], а во втором — эмпирическим потенциалом Баскеса [5]. После каждого этапа деформации систему релаксировали с использованием программы метода молекулярной динамики [6] к новому равновесному состоянию. В процессе проведения компьютерных экспериментов осуществляли непрерывный контроль за функцией радиального распределения атомов (ФРРА), температурой, энергией системы и другими параметрами. Проводился анализ расположения атомов в различных плоскостях.

### Результаты и их обсуждение

При анализе полученных результатов каждый эксперимент был условно поделен на несколько стадий. Начало и завершение стадии определялось по ФРРА. В эти моменты она состояла из пиков присущих ГЦК решетке. На каждой отдельной стадии ФРРА были либо сильно размыты, либо на них появлялись дополнительные пики. Так, в случае использования псевдопотенциала деформационный процесс начинается с полиморфного превращения [7]. В данном эксперименте правильная ОЦК решетка приходится на  $\varepsilon \approx 21\%$ , что соответствует сжатию элементарной ГЦК ячейки вдоль оси OZ от 0.356 до 0.286 nm и растяжению вдоль осей OX и OY от 0.356 до 0.399 nm. ФРРА для этих случаев представлены на рис. 1. Потенциальная энергия системы

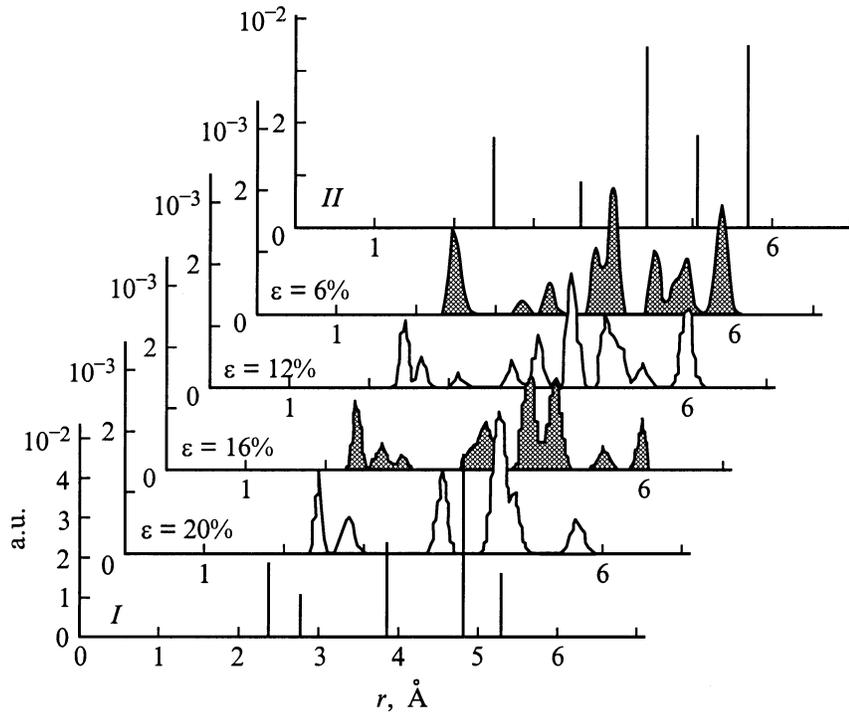


Рис. 1. Трансформация ФРРА. I — ОЦК, II — ГЦК.

в ходе этого процесса линейно увеличивалась с ростом деформации вплоть до 14%, после чего стала медленно убывать до окончания фазового перехода. В дальнейшем понижение потенциальной энергии происходило только за счет образования дефектов кристаллической решетки. Так, при  $\varepsilon \approx 24\%$  наблюдали смещение плоскостей  $(100)'$ ,<sup>1</sup> которые на данном этапе представляли собой плотноупакованные плоскости типа  $(111)$  в направлениях  $[010]'$  и  $[0\bar{1}0]'$ . Данное обстоятельство приводит к образованию дефектной структуры, в которой присутствуют как дефекты упаковки, так и двойники. На рис. 2 представлена плоскость кристалла типа  $(110)$   $\{(001)'\}$ , продеформированного на 30%, в котором межатомные и межплоскостные расстояния полностью соответствуют аналогичным расстояниям исходного монокристалла с ГЦК решеткой.

Следующий этап пластического течения характеризуется бездислокационным механизмом деформации. Последовательное расположение атомов в зависимости от степени деформации представлено на рис. 3. Вследствие коллективного движения атомов при  $\varepsilon = 40\%$  плотноупакованные плоскости  $\{(120)'\}$  составляют угол  $\alpha = 63.435^\circ$  с соответствующими плоскостями кристалла деформированного на 30%. Образовавшееся дефектное состояние отличается от предыдущего тем, что в нем присутствуют более протяженные области правильной

ГЦК прослойки. Начиная с этого момента деформация кристалла происходит за счет движения частичных дислокаций по различным плоскостям скольжения. Характерной особенностью этой стадии деформации является образование барьеров Ломер–Катрелла, которые прочно блокируют плоскости скольжения, тем самым снижая пластичность кристалла [8]. На рис. 4 представлена схема расположения атомов в плоскости типа  $(110)$  при

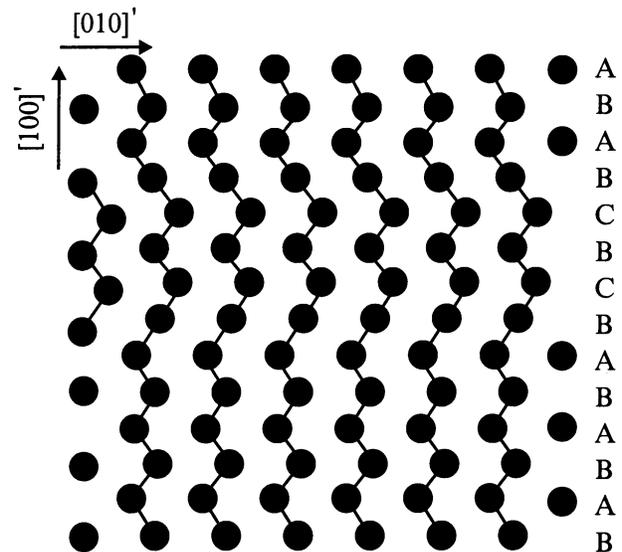


Рис. 2. Расположения атомов в плоскости типа  $(110)$ . Деформация  $\varepsilon = 30\%$ .

<sup>1</sup> Здесь и далее штрих означает, что определение символов направлений и плоскостей происходит относительно начальной системы координат.

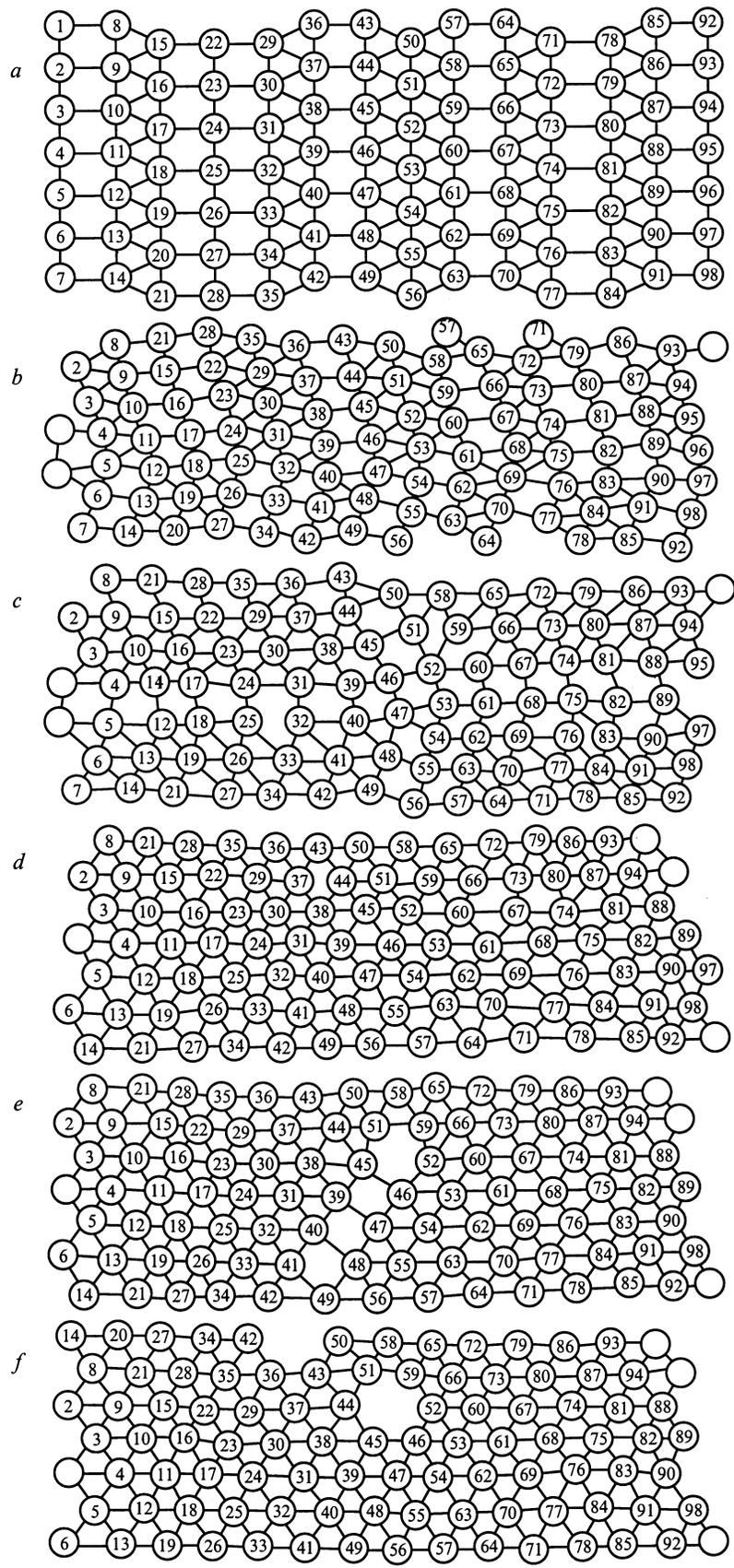


Рис. 3. Схема расположения атомов в плоскостях  $(120)'$ .  $\varepsilon = 32$  (a); 34 (b), 36 (c); 38 (d); 40% (e, f).

$\varepsilon = 60\%$ . Когда деформация достигает 70%, барьеры исчезают, а структура кристалла оказывается состоящей только из двойников, причем ФРРА становится вновь типичной для ГЦК решетки. Плотнупакованные плоскости в этом случае относительно начальной системы координат имеют индексы  $(3.5 \cdot 10)'$ . При этом значении деформации размер кристалла по оси OZ становится настолько мал, что делает невозможным в дальнейшем идентификацию механизма пластической деформации.

При описании межатомных взаимодействий потенциалом Баскеса на начальных этапах деформации наблюдается реализация схемы Закса [9]. Начиная с  $\varepsilon = 10\%$  последовательные сдвиги плоскостей (111) приводят к зарождению и росту двойников за счет частичных дислокаций. Смена направления скольжения и скользящих плоскостей, которая наблюдается при  $\varepsilon = 24\%$ ,

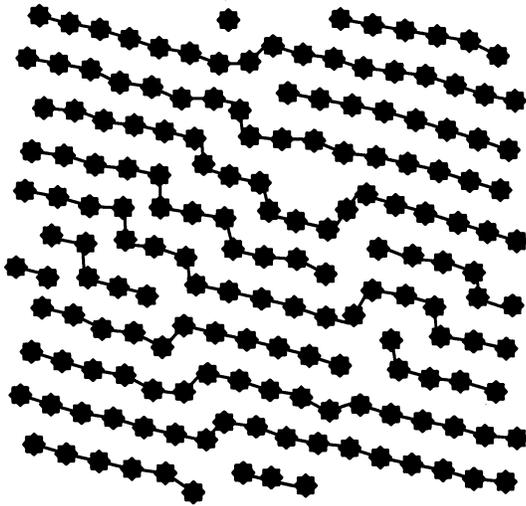


Рис. 4. Расположения атомов в плоскости типа (110). Деформация  $\varepsilon = 60\%$ .

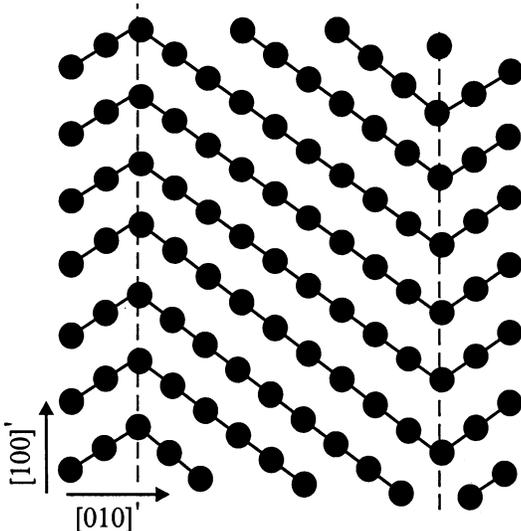


Рис. 5. Расположения атомов в плоскости типа (110). Деформация  $\varepsilon = 32\%$ .

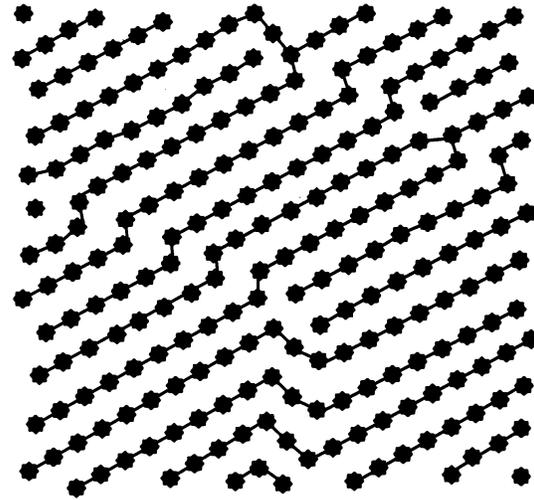


Рис. 6. Расположения атомов в плоскости типа (110). Деформация  $\varepsilon = 68\%$ .

приводит к тому, что к  $\varepsilon = 32\%$  плоскость  $(010)'$  первоначально идеальной решетки трансформируется в плоскость типа (111), а плоскость  $(001)'$  — в плоскость типа (110). Чередование плотноупакованных плоскостей представлено на рис. 5. На следующем этапе в результате многократного скольжения по различным плоскостям средняя область кристалла (между штриховыми линиями) при  $\varepsilon = 38\%$  имеет на две плоскости типа (111) больше. Однако впоследствии вновь наблюдается скольжение по одной системе и к  $\varepsilon = 52\%$  решетка становится бездефектной, но развернутой относительно начальной системы координат.

В дальнейшем процесс пластического течения носит более сложный характер из-за большого числа возникающих дефектов и взаимодействия между собой последних. Данное обстоятельство отображено на рис. 6, где представлена плоскость типа (110). Важно отметить, что при достижении  $\varepsilon = 70\%$  кристалл приобретает такую же структуру, как на рис. 4. Различие заключается в том, что у кристалла, деформированного на 70%, область между штриховыми линиями состоит всего лишь из трех плотноупакованных плоскостей.

Таким образом, несмотря на различие пластического поведения при использовании различных потенциалов, деформационный процесс в обоих случаях преимущественно протекает по двойниковому механизму. Смена механизма или схемы пластической деформации в данных экспериментах зависит не только от сил межатомного взаимодействия, размера кристаллита, но и от степени дефектности исследуемого объекта.

Проведенные компьютерные эксперименты показали, что при решении задач пластичности, в частности изучения механизмов пластической деформации, ЭВМ может служить эффективным методом исследования в решении подобных задач.

## Список литературы

- [1] *Дмитриев С.В., Овчаров А.А., Старостенков М.Д., Козлов Э.В.* // ФГТ. 1996. Т. 38. Вып. 6. С. 1805–1811.
- [2] *Шудегов В.Е., Лобастов А.И., Лихачев В.А.* и др. // ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 6. С. 94–101.
- [3] *Лобастов А.И., Шудегов В.Е., Чудинов В.Г.* // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 12. С. 100–102.
- [4] *Чудинов В.Г., Долгушева Е.Б., Юрьев А.А.* // Сверхпроводимость: физика, химия, техника. 1991. Т. 4. С. 2086–2092.
- [5] *Baskes M.I., Melins C.P.* // Phys. Rev. B. Vol. 20. N 8. P. 3197.
- [6] *Дядин В.М., Чудинов В.Г., Гондырева Л.И., Бычков Д.А.* Деп. в ВИНТИ. № 1537-В-91. М., 1991. 23 с.
- [7] *Новиков И.И., Розин К.М.* Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. М.: Металлургия, 1990. 336 с.
- [8] *Шаскольская М.П.* Кристаллография. М.: Высшая школа, 1976. 391 с.
- [9] *Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Елсукова Т.Ф., Иванчик А.К.* // Изв. вузов. Физика. 1982. Т. 25. № 6. С. 5–27.