

Компьютерное моделирование деформирования и разрушения кристаллов

© В.А. Лагунов, А.Б. Синани

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
E-mail: alfred@md1ab.ioffe.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 14 июня 2000 г.
В окончательной редакции 5 сентября 2000 г.)

Предложены методы компьютерного моделирования испытаний на прочность кристаллов, близкие к обычным статическим методам. С помощью этих методов получены данные о деформировании и разрушении идеальных кристаллов ГЦК при их различной ориентации по отношению к растягивающей силе. Обнаружены факты деформационного стимулирования фазового перехода решетки ГЦК в решетку ГПУ, образования и перемещения двойников. На микроуровне прослежены упругопластическое деформирование и разрушение кристаллов.

В [1,2] из атомов с межатомным потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса получены модели равновесных кристаллов шаровидной формы с диаметром 10 межатомных промежутков. Эти кристаллы обладают различной структурой, которая может быть причиной их разного поведения при нагружении. Настоящая работа была проведена с целью оценки прочностных свойств таких кристаллов. Для этого прежде всего необходимо было разработать метод определения прочности модельных кристаллов, по возможности близкий к методам, применяемым в условиях обычной статики. Этим методом необходимо было также оценить прочность бездефектных монокристаллов ГЦК и ГПУ, решетки которых самопроизвольно возникают в компьютерном эксперименте. Решетка ОЦК, которая исследовалась в работе [3], при задании потенциала Леннарда-Джонса, как показали наши данные [1], не формируется.

1. Постановка задачи

Модельные кристаллы сохраняются в компьютере в виде таблиц координат атомов x_i , y_i и z_i , где i пробегает значения от 1 до n включительно; n — число атомов в кристалле. Цилиндрические "образцы" для растяжения можно "приготовить" из полученных сферических кристаллов. Они должны иметь постоянное сечение вдоль образца, при этом координаты атомов должны удовлетворять условию

$$(y_i - y_0)^2 + (z_i - z_0)^2 < R^2, \quad (1)$$

где R — радиус образца, y_0 и z_0 — координаты его центра. В компьютерных экспериментах величина R составляла четвертую часть диаметра исходного кристалла. После приготовления цилиндрических образцов последние охлаждались по той же методике, что и кристалл для проведения релаксации поверхностного слоя [1].

"Захваты" для приложения внешней нагрузки целесообразно изготовить из поверхностного слоя концевых

краев образца. Для этого все атомы предварительно делятся на три группы: внутренние атомы и атомы левого и правого захватов.

Для определения прочности образцов надо решить во времени систему из n дифференциальных уравнений (n — число атомов)

$$m\partial^2 u_i / \partial t^2 = \sum_{j=1}^n f_x(r_{ij}), \quad (2a)$$

$$m\partial^2 v_i / \partial t^2 = \sum_{j=1}^n f_y(r_{ij}), \quad (2b)$$

$$m\partial^2 w_i / \partial t^2 = \sum_{j=1}^n f_z(r_{ij}), \quad (2c)$$

где m — масса атома, u_i , v_i и w_i — смещение i -го атома вдоль координатных осей, $f(r_{ij})$ — модифицированная сила Леннарда-Джонса между атомами i и j [1]. Эта система целиком справедлива для внутренних атомов ансамбля.

К системе (2) надо добавить уравнения для поверхностных атомов в захватах вдоль оси x , к которым приложены внешние силы, изменяющиеся во времени по заданному закону, например по линейному. Для атомов левого захвата, в котором растягивающая сила направлена влево, должны выполняться соотношения

$$m\partial^2 u_i / \partial t^2 = \sum_{j=1}^n f_x(r_{ij}) - F(t)/n1, \quad (3a)$$

где $F(t)$ — растягивающая сила, зависящая от времени, $n1$ — число атомов в левом захвате. Аналогичные соотношения

$$m\partial^2 u_i / \partial t^2 = \sum_{j=1}^n f_x(r_{ij}) + F(t)/n2 \quad (3b)$$

можно записать для атомов правого захвата.

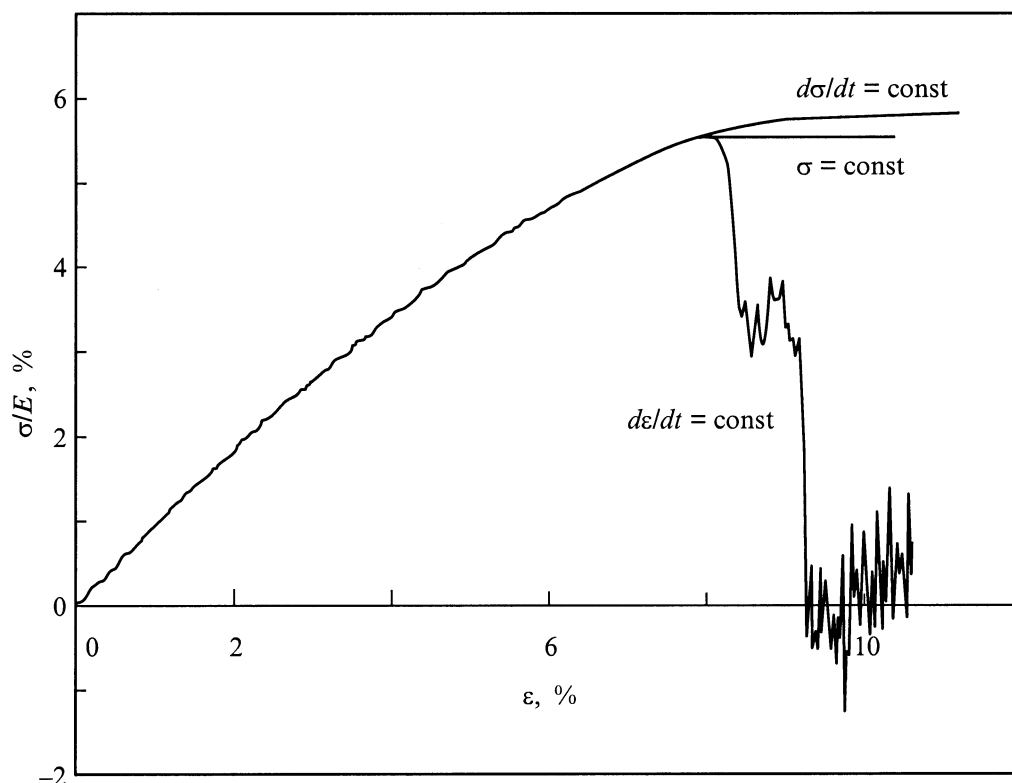


Рис. 1. Начальная фаза диаграммы растяжения образца [1] в разных методах измерения прочности.

Для упрощения задачи можно считать, что атомы захватов ведут себя как единое целое. Для них на основании выражений (2b), (2c), (3a) и (3b) вычисляются средние по захватам значения приращений, полагаемые одинаковыми для всех атомов данного захвата. Разбиение атомов образца на внутренние, подчиняющиеся уравнениям (2), атомы левого и правого захватов, для которых справедливы соотношения (3), производится один раз в начале компьютерного эксперимента. Поверхностные атомы, к которым прилагаются внешние усилия, выбираются на основе вычисления числа ближайших соседей каждого атома в захвате; поверхностным считается тот атом, у которого это число меньше десяти.

Решение уравнений (2) и (3) производилось методом вторых конечных разностей [4]. Результатом решения являлось получение диаграммы напряжение–деформация образца, а также серии кадров процесса растяжения. Напряжение выражается в единицах модуля Юнга, а деформация вычисляется как средняя по всей длине образца.

2. Результаты вычислений

Уравнения (2) и (3) позволяют моделировать разрушение образца при постоянной скорости нагружения, а также при постоянной внешней силе в условиях ползучести. Были внесены изменения в программу для возможности

моделирования разрушения и при постоянной скорости деформирования образца. Указанными тремя методами было проведено разрушение "образца", изготовленного из кристалла [1]. Результаты проведенных расчетов показаны на рис. 1.

Как видно, на стадии упругого нагружения результаты различных способов нагружения совпадают, принципиальное различие проявляется только после достижения критической деформации, составлявшей у исследованного образца примерно 8%. При этой деформации прочность модельного монокристалла составляет 5.5% модуля Юнга, что несколько ниже предсказанной Орована теоретической прочности кристаллов [5]. После предельного растяжения при постоянной скорости нагружения происходит быстрое нарастание длины образца, заканчивающееся его разрывом, а при сохранении скорости деформирования в результате структурных изменений наблюдаются спад напряжения и возникновение решеточных колебаний в образце.

Рис. 1 показывает, что без предварительного подогрева образца опыты по ползучести можно проводить лишь при напряжениях, близких максимальному. Поэтому было выбрано такое минимальное напряжение, при котором образец разрывался за обозримое время.

Прежде всего расчеты прочности были проведены для образцов, полученных из идеальных ГЦК-кристаллов в равновесном состоянии. На рис. 2,а приведены ре-

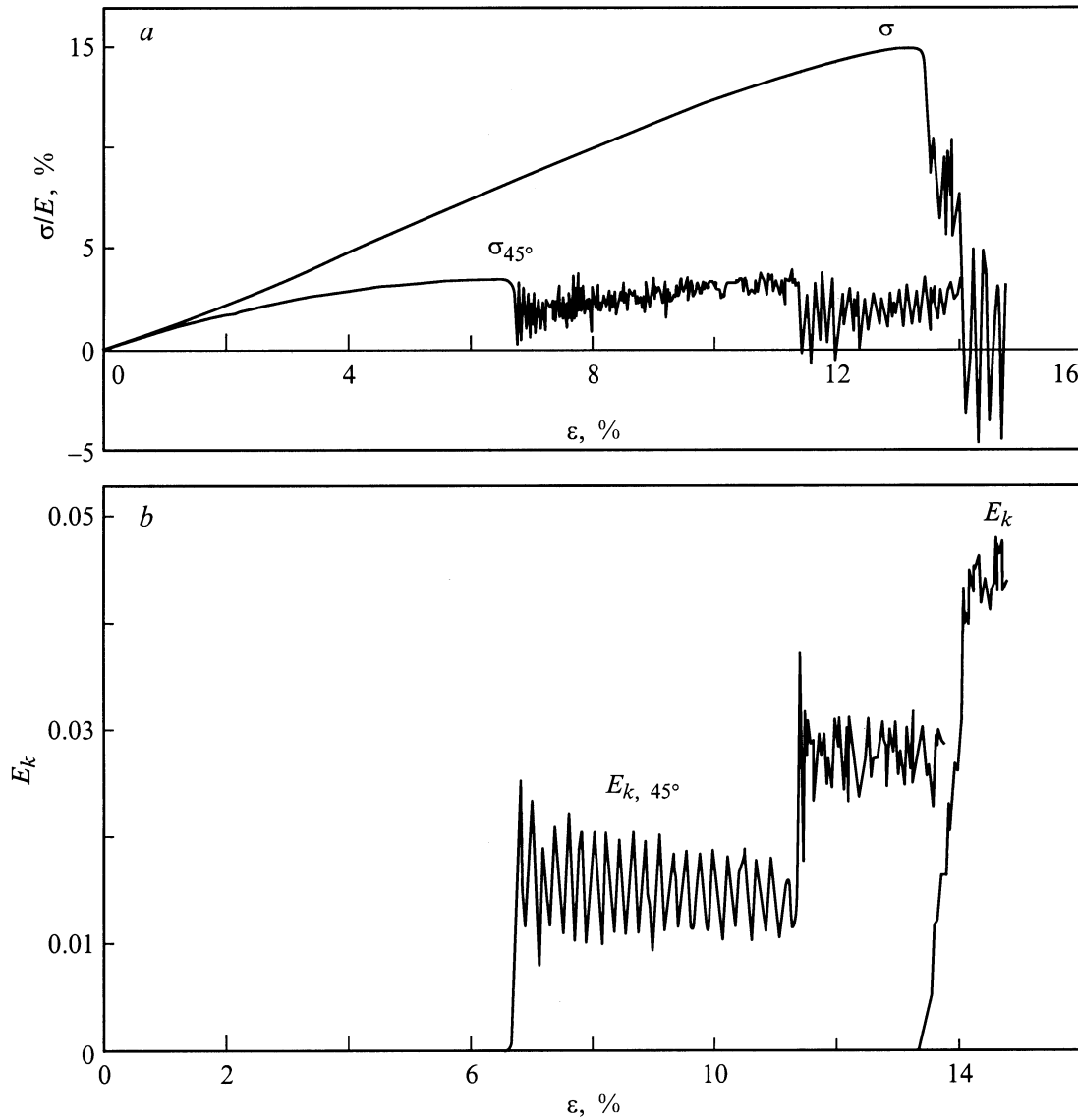


Рис. 2. Диаграммы растяжения (а) и средней кинетической энергии атомов (б) кристаллов ГЦК при постоянной скорости $d\epsilon/dt$ в АР.

зультаты растяжения двух образцов ГЦК с различной ориентацией. Нагружение в образцах осуществлялось по направлениям кристалла 100 и 110. Расчет показывает, что после поворота кристалла на 45° по отношению к направлению действующей силы в 3.4 раза повысился модуль нормальной упругости образца. Прочность исследованного кристалла при этом упала на 20%, а его упругая предельная деформация снизилась более чем вдвое.

На рис. 2, б приведены также расчеты средней кинетической энергии атомов при растяжении кристаллов ГЦК. Найденная величина получена на основании измерения кинетической энергии всех атомов системы. Рисунок демонстрирует практически мгновенное (за время порядка периода решеточных колебаний) повышение средней тепловой энергии атомов кристаллов (на $0.015D$ при

деформации 6.7%; на $0.027D$ и на $0.045D$ при 11.5% для вытяжки вдоль осей 110 и 100 соответственно, где D — энергия диссоциации пары атомов) в моменты времени, совпадающие с моментами быстрого падения их прочности.

Данные рис. 2 получены в условиях сохранения энергии атомов образца при проведении компьютерного эксперимента в адиабатическом режиме деформирования (АР). Именно этим объясняется появление решеточных колебаний атомов в моменты внезапной перестройки структуры образца и быстрого снижения его прочности. Для устранения указанного эффекта по аналогии с методом искусственного демпфирования [6] был запрограммирован квазиизотермический режим нагружения (КИР), значительно снижающий возможность появления колебаний атомов.

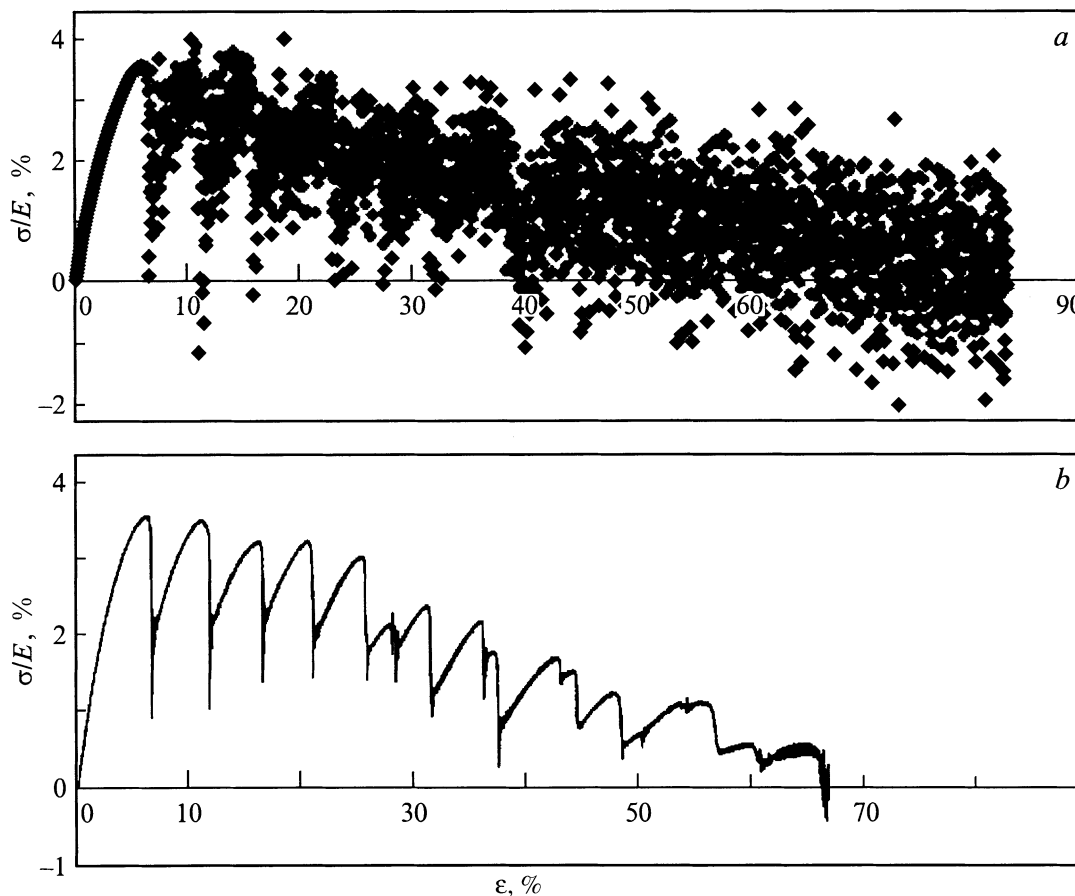


Рис. 3. Диаграммы растяжения кристалла ГЦК при нагружении вдоль направления 110 в АР (*a*) и КИР (*b*) при постоянной скорости $d\varepsilon/dt$.

Сопоставление диаграмм растяжения от начала деформирования образца до момента его разделения при АР (рис. 3, *a*) и КИР (рис. 3, *b*), близком к растяжению при абсолютном нуле температуры, показывает их значительное различие. В первом случае нагружение сопровождается более глубокими и частыми возмущениями в структуре образца; кроме того, увеличивается его удлинение до разрыва.

На рис. 4 приведена кинограмма начальной фазы растяжения образца вдоль направления 110 при постоянной скорости деформирования и пластическом переходе его из одного упругого состояния в другое при КИР.¹ На кинограмме зафиксированы центральные сечения одной из проекций образца в моменты времени, когда, согласно рис. 3, *b*, сопротивление деформированию образца достигает первого локального минимума. Согласно рисунку, при достижении деформации 6.7% (кадры 1 и 2) в течение промежутка времени, сравнимого с периодом решеточных колебаний атомов, наметившееся сужение образца заканчивается фазовым превращением части ячеек ГЦК в ГПУ и перераспределением деформации.

¹ Время измеряется периодами решеточных колебаний атомов $t = \tau/T$, где τ — текущее время, T — период колебаний атомов.

В образце под углом 45° к направлению внешней силы образуются два слоя атомов ГПУ.

На кадре 3 при $\varepsilon = 11.9\%$ зафиксировано разделение двухслойной полосы атомов ГПУ на две одиночные полосы и появление двух границ двойника, на каждой из которых наблюдается зеркальная симметрия атомов ГЦК. При этом в половине ячеек происходит обратный переход ГПУ \rightarrow ГЦК, а в соседней полосе — прямой переход ГЦК \rightarrow ГПУ, в результате чего одна из границ двойника смещается на одно межатомное расстояние параллельно себе, вызывая тем самым локальную упругую деформацию. При дальнейшем растяжении образца наблюдается зарождение двойника под другим углом, благоприятствующим образованию полосы сброса (кадры 4 и 5).

Внезапность фазового перехода хорошо видна из рис. 5. На этом рисунке при АР с высоким временным разрешением, начиная с момента времени $t_0 = 80$, показано изменение угла поворота отрезка между третьей и пятой центральными парами атомов в возбужденной зоне относительно оси внешней силы. Атомы указанных пар на кадре 1 кинограммы рис. 4 изображены кружками. В стадии упругого деформирования образца не наблюдались повороты решетки относительно действующей

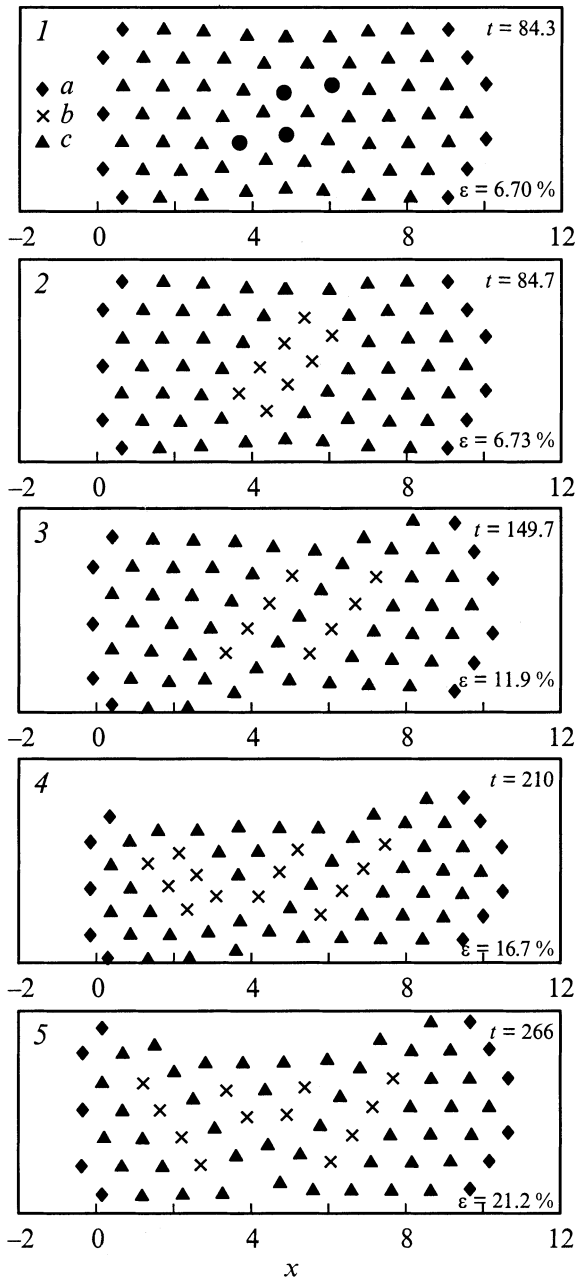


Рис. 4. Кинограмма растяжения кристалла ГЦК при нагружении вдоль направления 110 с постоянной скоростью $d\varepsilon/dt$ в КИР. *a* — атомы захватов, *b* — атомы ячеек ГПУ, *c* — атомы ячеек ГЦК и "поверхностные" атомы.

силы. Согласно рисунку, угол поворота между указанными парами атомов, особенно, в начальной стадии деформации образца с большой точностью описывается одной кривой.

Рис. 4, 5 доказывают высокую скорость фазового перехода решеток и синхронность движения атомов в возбужденной зоне. Эти данные свидетельствуют о том, что время фазового превращения сравнимо с периодом основных решеточных колебаний атомов решетки. Измерения угла были предприняты для визуализации

появления дислокации. Однако вместо дислокационного механизма был зафиксирован механизм структурных фазовых превращений решетки ГЦК в решетку ГПУ, а также образование и перемещение двойника. Заметим, что решетки ГЦК и ГПУ с одинаковым количеством атомов в ячейке отличаются лишь симметрией: так, в решетке ГПУ она зеркальная, а у ГЦК инверсная.

На рис. 5 проявляются также высокочастотные колебания с периодом примерно 5, обусловленные, вероятно, изгибными колебаниями образца, которые возникают при образовании полос сброса. Им соответствуют ясно видимые колебания кинетической энергии атомов на рис. 2, *b* с периодом, уменьшенным в 2 раза.

Более детальная картина фазового превращения атомов ГЦК в ГПУ при растяжении кристаллов ГЦК с постоянной скоростью $d\varepsilon/dt$ показана на рис. 6. Этот рисунок также свидетельствует о мгновенном стимули-

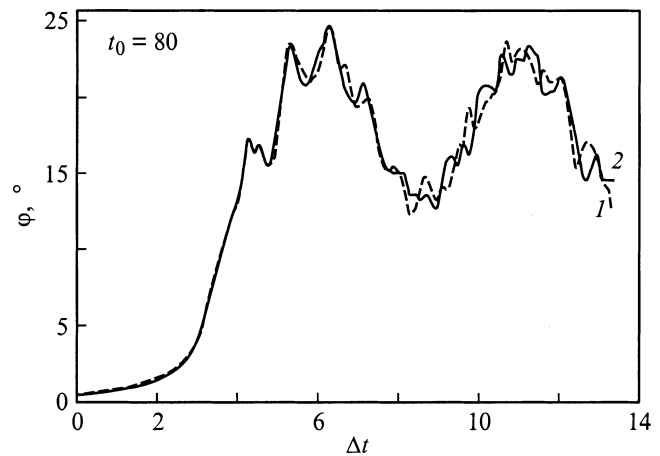


Рис. 5. Изменение во времени угла поворота пар атомов (в градусах) в зоне сброса в АР с высоким временным разрешением. 1 — центральные атомы третьего слоя, 2 — атомы пятого слоя.

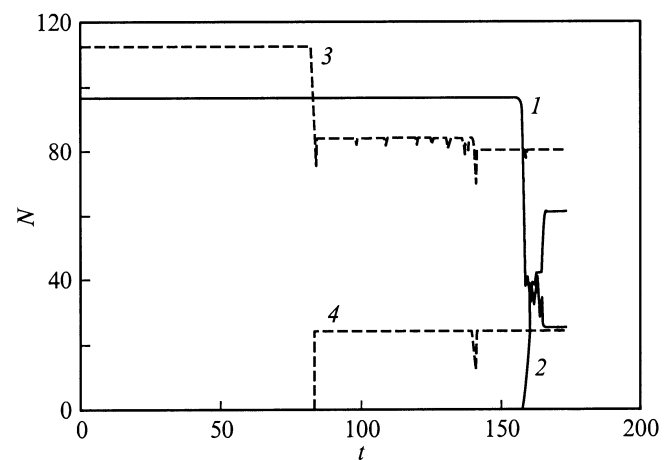


Рис. 6. Изменение во времени числа атомов ГЦК (1, 3) и ГПУ (2, 4) у кристаллов ГЦК при растяжении с постоянной скоростью $d\varepsilon/dt$ вдоль направления 100 (1, 2) и 110 (3, 4).

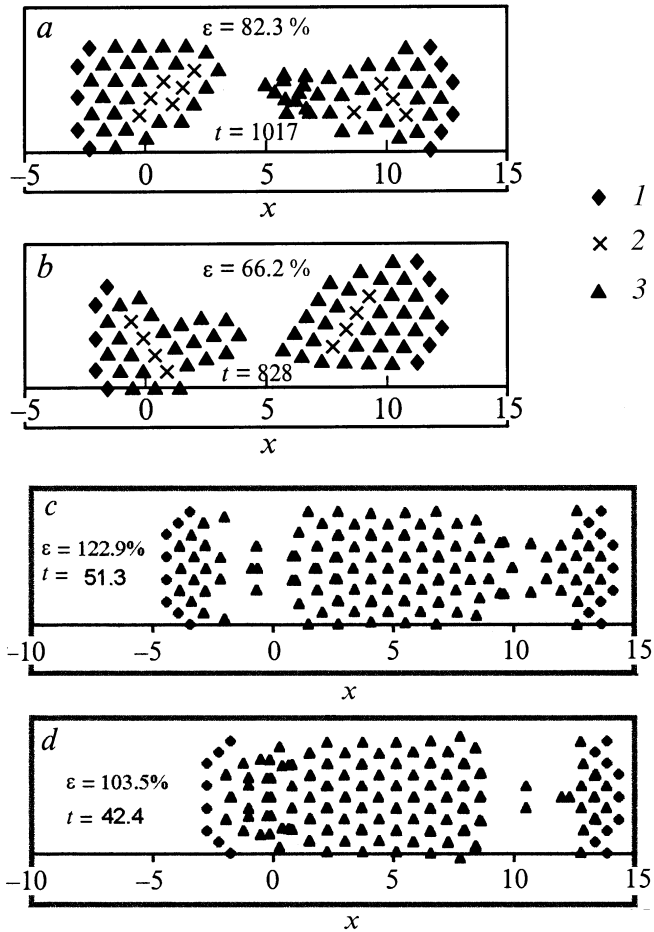


Рис. 7. Разрушение кристалла ГЦК при нагружении вдоль направления 110 с постоянными скоростями $d\varepsilon/dt$ (a, b) и $d\sigma/dt$ (c, d) в режимах АР (a, c) и КИР (b, d). 1 — атомы захватов, 2 — центральные атомы ячеек ГПУ, 3 — атомы ячеек ГЦК и "поверхностные" атомы.

рованном деформацией фазовом переходе ГЦК → ГПУ. Обращает на себя внимание факт превращения ячеек ГЦК не только в ячейки ГПУ, а также, наиболее вероятно, в поверхностные атомы, на что указывает разная величина скачков в моменты перехода на кривых ГЦК и ГПУ.

Разрушение образца ГЦК при АР (a) и КИР (b) демонстрирует рис. 7. Видно, что при постоянной скорости $d\varepsilon/dt$ разделение образца на две половины происходит в первом случае при деформации $\varepsilon = 82.3\%$, а во втором — при деформации, составляющей 66.2% . Таким образом, в первом случае наблюдается большая пластичность как по величине предельной деформации, так и по внешнему виду разрушенного образца. Более четкая картина образующихся двойников видна из рис. 7, b, который получен при растяжении с практически полным подавлением кинетической энергии атомов. На этом рисунке изображены кадры того же сечения образца, что и на рис. 4. Разрушение образца фиксировалось программой автоматически.

Данные о разрыве кристаллов ГЦК и ГПУ при постоянной скорости $d\sigma/dt$, когда на каждом шаге интегрирования приращение силы ΔF составляло 0.01, обеспечивая примерно одно и то же время упругого нагружения, что и в случае постоянной скорости $d\varepsilon/dt$, приведены на рис. 8. Прочность кристаллов ГПУ (по абсолютной величине) значительно (на $\sim 25\%$) ниже, чем кристаллов ГЦК; их однородное растяжение прекратилось раньше. По-видимому, это связано с различной начальной ориентацией кристаллов ГЦК и ГПУ и их разной способностью деформирования. На этом рисунке также показано, как меняется средняя тепловая энергия атомов в единицах энергии диссоциации D . Она рассчитывалась с учетом кинетической энергии разлетающихся осколков после разрушения образца.

Появление максимума на кривой изменения энергии атомов вызвано разрушением образца, которое происходит при почти двукратной деформации. На рис. 7, c и d при постоянной скорости нагружения $d\sigma/dt$ зафиксировано сечение образца непосредственно перед разрывом при расчете в режимах АР и КИР. Как видно, при постоянной скорости нагружения характерно образование двух шеек вблизи захватов, а также повышенная предельная деформация по сравнению со случаем постоянной скорости деформирования $d\varepsilon/dt$, причем в КИР не происходит фазового превращения ГЦК ↔ ГПУ. При этом в обоих случаях кристаллы ГЦК и кристаллы ГПУ ведут себя как тела упругопластичные.

Таким образом, в проведенных компьютерных экспериментах с помощью разработанных методов получены данные о прочности бездефектных кристаллов ГЦК и ГПУ при их разной ориентации. В них обнаружено значительное влияние на прочность ориентации образца по отношению к внешней силе. В опытах показано проявление при разрыве кристаллов механизма пласти-

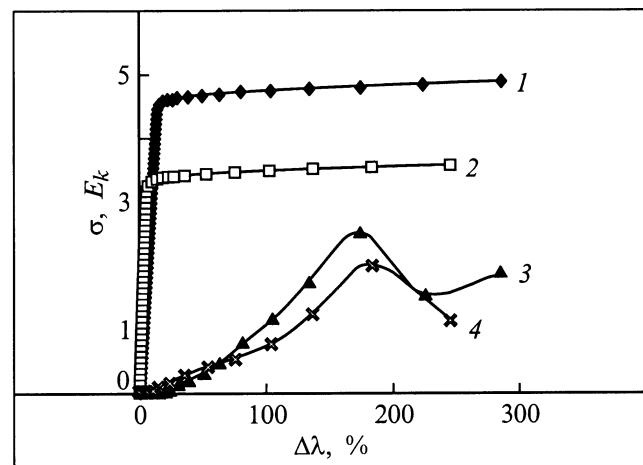


Рис. 8. Диаграммы растяжения (1, 2) и кривые изменения средней кинетической энергии атомов (3, 4) кристаллов ГЦК (1, 3) и ГПУ (2, 4) при постоянной скорости $d\sigma/dt$ в АР. $\Delta\lambda$ — приращение расстояния между захватами (в процентах к начальной длине образца).

ческой деформации вследствие фазового превращения ГЦК \leftrightarrow ГПУ и проявления механизма деформирования путем образования и перемещения двойников.

Список литературы

- [1] В.А. Лагунов, А.Б. Синани. ФТТ **40**, 10, 1919 (1998).
- [2] В.А. Лагунов, А.Б. Синани. ФТТ **42**, 6, 1087 (2000).
- [3] А.И. Лобастов, В.Е. Шудегов, В.Г. Чудинов. ЖТФ. **67**, 12, 100 (1997).
- [4] L. Verlet. Phys. Rev., *1*, 98 (1967).
- [5] E. Orowan. Fatigue and fracture of metals. N. Y. (1952). 135 p.
- [6] Ю.М. Плишкин. В сб.: Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ. Наука, Л. (1980). С. 77.