

01,14

Молекулярно-динамическое исследование развития дислокационной структуры ГЦК-кристалла, содержащего ансамбль сферических пор, при внешнем силовом воздействии

© А.В. Маркидонов¹, М.Д. Старостенков², В.Н. Липунов², Д.А. Лубяной³, П.В. Захаров⁴

¹ Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, Новокузнецк, Россия

² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия

³ Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева, Прокопьевск, Россия

⁴ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: markidonov_artem@mail.ru

Поступила в Редакцию 25 января 2023 г.

В окончательной редакции 13 апреля 2023 г.

Принята к публикации 13 апреля 2023 г.

Борьба с радиационным распуханием является одной из наиболее актуальных проблем в радиационном материаловедении. Для ее успешного решения требуется понимание особенностей механизмов залечивания пор. В связи с этим существуют разнообразные экспериментальные и теоретические работы, посвященные данной теме. В настоящее время, в связи с увеличением мощности вычислительных средств, компьютерное моделирование позволяет проводить все более сложные исследования и применяется, в том числе, в области материаловедения. В настоящей работе приведены результаты молекулярно-динамического моделирования, посвященного исследованию процессов залечивания группы сферических пор в ГЦК-кристалле, подверженному сдвиговой деформации. Как показало проведенное исследование для пор, располагающихся в непосредственной близости друг от друга, характерно образование общей дислокационной петли, образующейся в результате притяжения отдельных петель, имеющих участки с противоположными знаками винтовой ориентации. Формирование и последующее развитие такой петли способствует уменьшению свободного объема, локализованного в кристалле в виде пор. Кроме того, отдельно рассмотрены структурные преобразования, возникающие при генерации в расчетной ячейке ударной волны, которая создает дополнительные напряжения. В данном случае также наблюдается формирование описанной выше петли и последующее схлопывание отдельных пор. Учитывая, что моделирование проводилось при температурах, недостаточных для активизации диффузионных процессов, а при модельных экспериментах с генерацией волны применялась процедура термостатирования, то можно сделать вывод, что ударная волна является причиной схлопывания поры даже в отсутствие высоких температур, а одним из основных механизмов данного процесса является развитие дислокационной структуры ансамбля пор.

Ключевые слова: кристалл, модель, деформация, пора, дислокация.

DOI: 10.21883/FTT.2023.05.55486.10

1. Введение

Известно, что внешнее воздействие на кристаллическую структуру тела, например, ускоренными частицами, когда имеет место передача энергии узлам решетки, сопровождается образованием стабильных радиационных дефектов. При достаточном вакансионном пересыщении формируются вакансионные кластеры, представляющие собой поры различных размеров. В результате последующей коалесценции в процессе стремления к уменьшению свободной поверхности происходит рост более крупных пор за счет поглощения мелких, и формируется ансамбль пор [1,2]. В некоторых случаях данное явление, сопровождающееся увеличением объема облученного материала, крайне нежелательно, поэтому проблеме борьбы

с радиационным распуханием уделяется пристальное внимание.

Учитывая тот факт, что материал в процессе эксплуатации подвергается различным силовым нагрузкам, становится очевидным, что возникающие напряжения должны оказывать влияние на процесс эволюции вакансионных скоплений. Так в работах [3–5] показано, что пора является источником дислокаций, которые зарождаются под воздействием внешних напряжений. Таким образом, вокруг пор формируются области деформации, локализованной в виде дислокаций, и в случае их пересечения происходит коалесценция пор.

Согласно представлениям, развитых в классических работах Гегузина [6,7], залечивание пор при умеренных температурах и приложенных напряжениях осуществляется за счет роста дислокаций, когда возникающие кас-

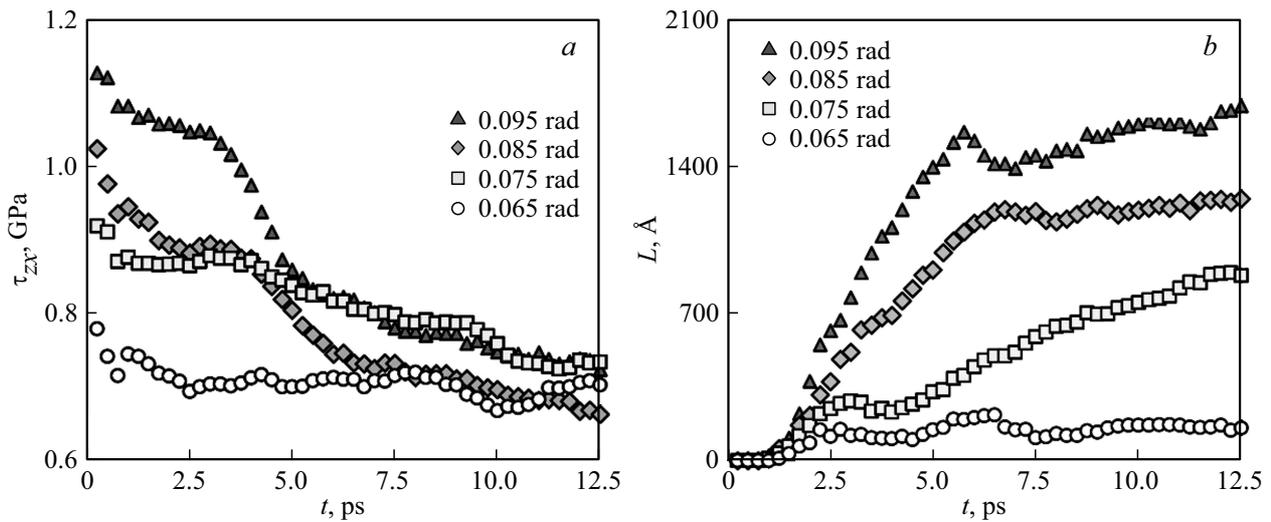


Рис. 1. Изменение касательных напряжений и суммарной длины L дислокационных петель в расчетной ячейке в процессе моделирования при различных углах сдвига γ .

тельные напряжения преодолевают пороговое значение и срабатывает источник Франка–Рида. Формирование дислокационной петли приводит к смещению границы поры на величину вектора Бюргерса. Следовательно, степень залечивания определяется числом сгенерированных дислокационных петель. Размер поры стабилизируется после того, как внешнее воздействие будет компенсировано напряжениями, создаваемыми испущенными дислокационными петлями.

Ранее авторами в работах [8,9] были рассмотрены процессы зарождения дислокационных петель на поверхности пор сферической и цилиндрической формы под воздействием ударных послекаскадных волн и их последующее залечивание. Целью настоящей работы является установление механизмов залечивания ансамбля пор, находящегося в деформированном кристалле, под воздействием ударных волн.

2. Методика исследования

В качестве метода исследования было выбрано молекулярно-динамическое компьютерное моделирование. Данный выбор обусловлен тем, что указанный выше метод позволяет отследить динамику системы, состоящей из достаточно большого количества взаимодействующих частиц, при относительно небольших затратах вычислительных ресурсов, а в дальнейшем полученные результаты могут быть сопоставлены с реальными экспериментальными, тем самым преодолевая одну из основных проблем применения методов компьютерного моделирования.

Для проведения вычислений была построена расчетная ячейка, имитирующая ГЦК-кристалл, содержащая около 60 000 частиц, и бесконечная протяженность которой достигалась использованием периодических граничных условий. Пространственная ориентация осей

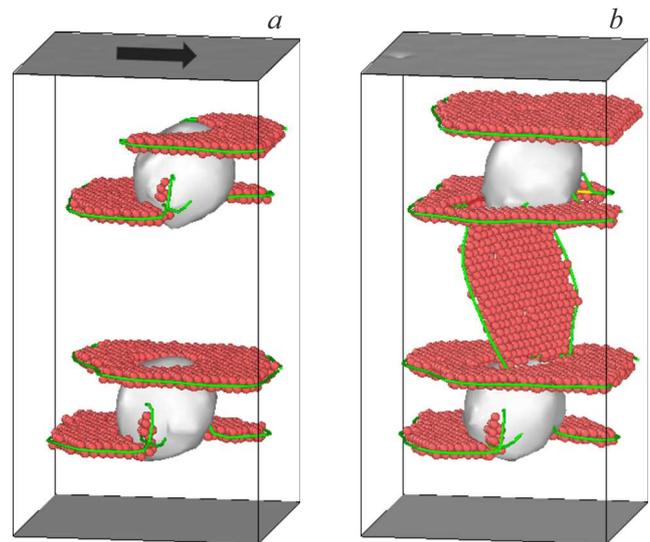


Рис. 2. Визуализация дислокационной структуры через 12.5 ps модельного времени при углах сдвига $\Gamma = 0.075$ (a) и 0.08 (b) rad. Показаны атомы, локальное окружение которых соответствует ГПУ-решетке. Стрелкой обозначено направление сдвига.

ячейки соответствовала кристаллографическим направлениям $[1\bar{1}0]$, $[11\bar{2}]$ и $[111]$. Межчастичное взаимодействие описывалось с помощью потенциала Джонсона, рассчитанного в рамках метода погруженного атома [10]. Параметры модели были подобраны для Au. Интегрирование уравнений движения, описывающих поведение системы частиц, осуществлялись при помощи скоростного алгоритма Верле с временным шагом 5 fs.

Поры в расчетной ячейке создавались путем выделения сферических областей различного радиуса, центр которых совпадал с узлом кристаллической решет-

ки, и последующим удалением частиц, принадлежащих этой области. После этого осуществлялась релаксация системы и полученная конфигурация, приведенная к минимуму потенциальной энергии, использовалась для дальнейшего исследования.

3. Результаты моделирования

Рассмотрим расчетную ячейку, содержащую две поры радиусом $4a_0$, где a_0 — равновесный параметр решетки, подверженную сдвиговой деформации параллельно кристаллографической плоскости (111) вдоль направления $[1\bar{1}0]$. Выбор данного направления сдвига обусловлен тем, что, как показало исследование в работе [8], в данном случае наблюдается устойчивое образование дислокационных петель, что для нас представляет наибольший интерес. После деформирования расчетной ячейки, ее

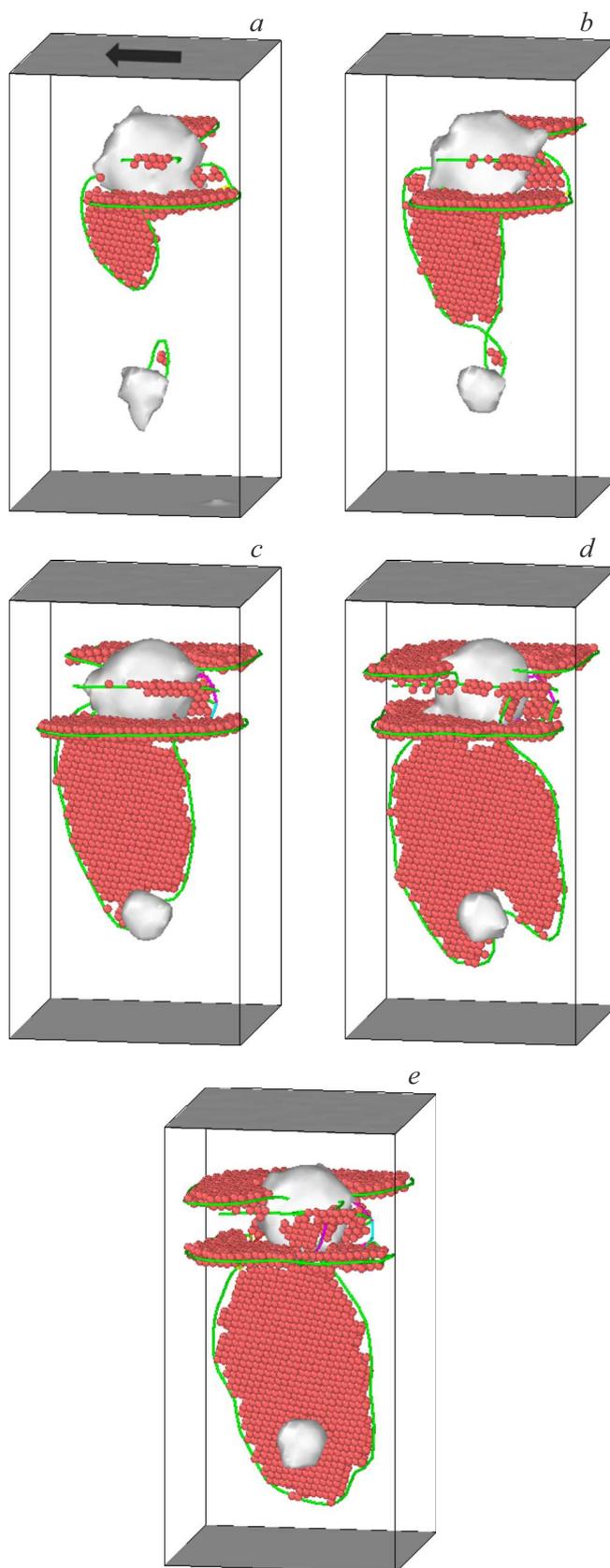


Рис. 3. Визуализация дислокационной структуры через 4.5 (a), 5 (b), 6.25 (c) и 7.5 (d) ps модельного времени при угле сдвига $\gamma = 0.08$ rad.

Рис. 4. Визуализация дислокационной структуры через 4.75 (a), 5.75 (b), 7.5 (c), 12 (d) и 15 (e) ps модельного времени при угле сдвига $\gamma = 0.085$ rad и порах разного радиуса.

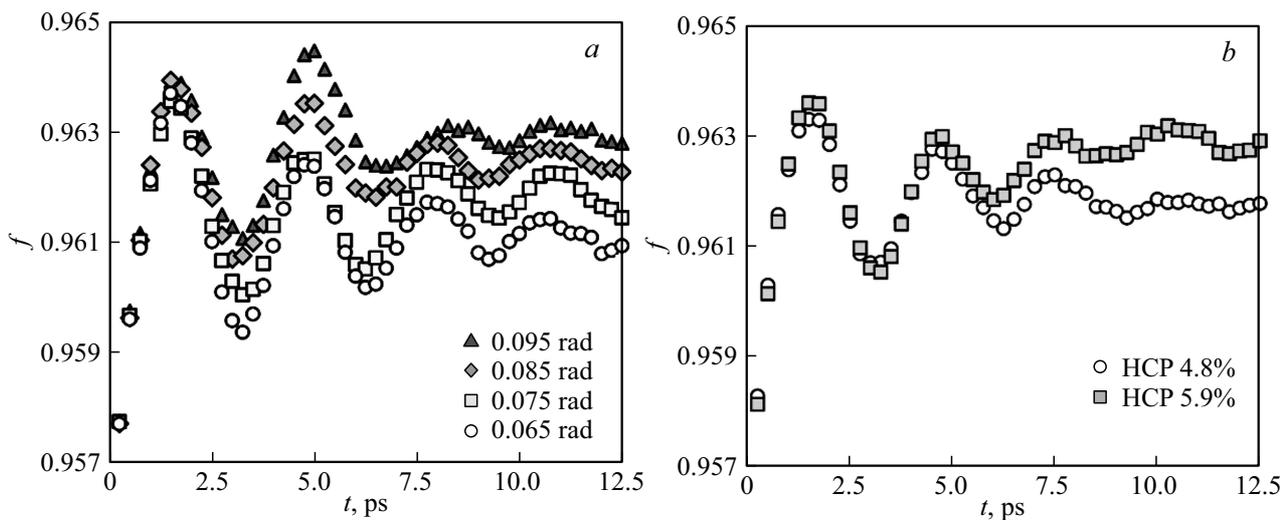


Рис. 5. Изменение объемной доли „фазы вещества“ f при различных углах сдвига γ (a) и при различном развитии дислокационной структуры (b) (угол сдвига $\gamma = 0.08$ rad).

геометрия сохраняется при помощи дополнительного использования жестких граничных условий, и затем следует процедура отжига при заданной температуре 300 К. Такая температура не позволяет активизироваться диффузионным процессам растворения поры, и, следовательно, позволяет исследовать дислокационный механизм. Выполненные расчеты показали, что касательные напряжения в расчетной ячейке в процессе моделирования начинают понижаться, что свидетельствует о происходящих структурных изменениях, при этом по мере увеличения угла сдвига в течение нескольких пикосекунд модельного времени наблюдается наибольший спад (см. рис. 1, a).

Визуализация структуры, выполненная средствами стороннего программного обеспечения [11], продемонстрировала образование на порах дислокационных петель сдвига, располагающихся в плоскостях семейства $\{111\}$ (см. рис. 2). При построении данного изображения выделялась свободная поверхность в объеме расчетной ячейки, т.е. пора, атомы, локальное окружение которых отлично от ГЦК (дефекты упаковки), и дислокационные линии, определенные с помощью алгоритма DXA (dislocation extraction algorithm) [12]. С помощью данного алгоритма дополнительно была подсчитана суммарная длина дислокационных линий, идентифицируемых в расчетной ячейке, что позволило оценить развитие дислокационной структуры при различных углах сдвига (см. рис. 1, b).

Как следует из рис. 2, b при угле сдвига $\gamma = 0.08$ rad формируется дислокационная петля, примыкающая к обоим порам. Более детальное исследование показало, что в данном случае, петля сдвига, зародившаяся на поверхности одной из пор, постепенно увеличивается в размерах, но при этом, в отличие от других образовавшихся петель, после преодоления критического положения, с точки зрения источника Франка–Рида, не

расширяется вокруг места образования, а вытягивается по направлению к поверхности соседней поры (см. рис. 3).

Подобный процесс взаимодействия ансамбля пор наблюдается и при других радиусах моделируемых пор (см. рис. 4). При этом формируются дислокационные петли, имеющие участки с противоположными знаками винтовой ориентации. Благодаря этому они притягиваются и аннигилируют, образуя единую петлю, которая, продолжая расширяться, пересекает меньшую пору (в данном случае с радиусом $2a_0$).

Создаваемая сдвиговая деформация и последующее развитие дислокационной структуры приводит к уменьшению свободного объема расчетной ячейки, локализованного в виде пор. Для его оценки применялся алгоритм, изложенный в работе [13], который идентифицирует свободную поверхность. При этом, на наш взгляд, удобнее оценивать отношение объема, занятого частицами системы, к общему объему расчетной ячейки, для обозначения которого будем использовать термин удельный объем „фазы вещества“ f [9]. Проведенное исследование показало, что при росте угла сдвига — величина f также растет (см. рис. 5, a).

Увеличивая расстояние между порами, удается добиться ситуации, при которой не формируется петля, их охватывающая. Таким образом, дислокационная структура оказывается менее развитой и величина f при этом оказывается ниже (см. рис. 5, b). В данном случае развитие дислокационной структуры оценивается с помощью доли атомов, локальное окружение которых соответствует ГПУ-решетке.

Следовательно, можно сделать вывод, что формирование единой дислокационной петли, охватывающей ансамбль пор, вносит значительный вклад в процесс уменьшения свободного объема, локализованного в кристалле.

Если дополнительно повышать температуру расчетной ячейки, то активизируются диффузионные процессы и поры начинают растворяться. Для наглядности на рис. 6 приведены результаты вычисления f при различной температуре расчетной ячейки, содержащей ансамбль пор радиусом $4a_0$ и $2a_0$. В данном случае при начальной температуре $T_0 = 600$ К наблюдается растворение поры с меньшим радиусом, а при $T_0 = 900$ К растворяются уже обе поры и f становится равной 1.

Ранее авторами в работах [14,15] было показано, что ударная волна, создаваемая в расчетной ячейке, приводит к различным изменениям дефектной структуры моделируемого кристалла, а также создает дополнительные касательные напряжения [16]. В связи с этим интерес вызывает исследование влияния ударной волны на ан-

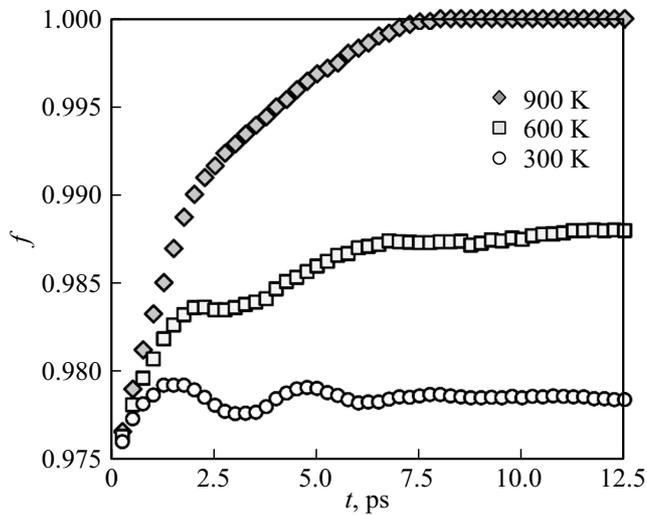


Рис. 6. Изменение объемной доли „фазы вещества“ f при различной температуре расчетной ячейки (угол сдвига $\gamma = 0.075$ rad, поры различного размера).

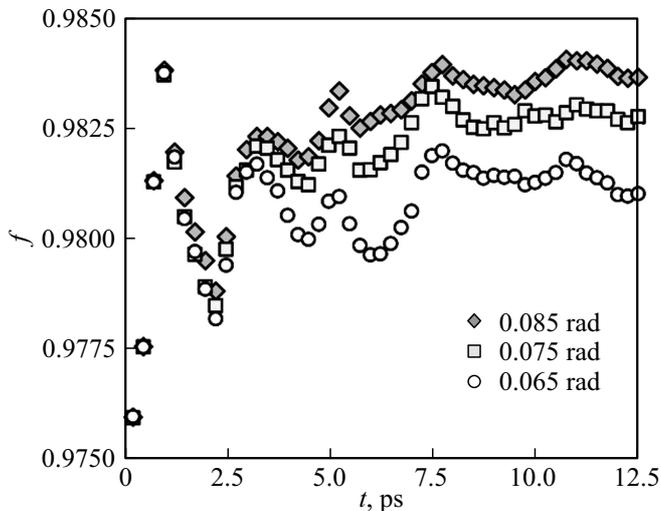


Рис. 7. Изменение объемной доли „фазы вещества“ f при различных углах сдвига γ в случае генерации в расчетной ячейке ударной волны (поры различного размера).

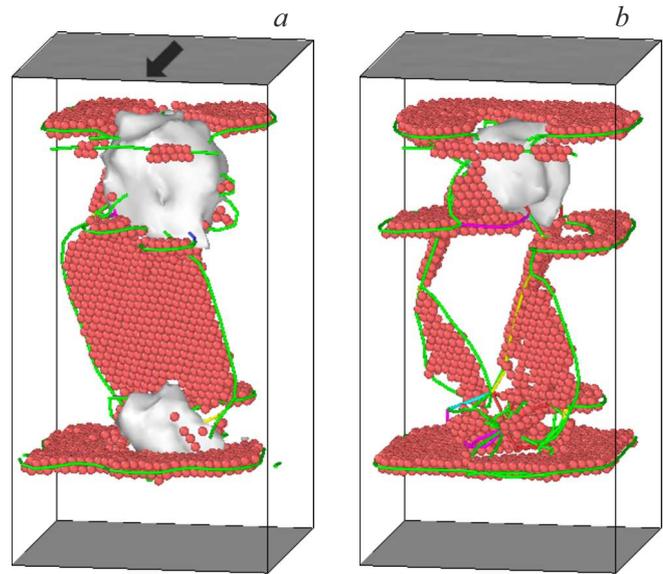


Рис. 8. Визуализация дислокационной структуры через 5.5 (a) и 14.25 (b) ps модельного времени при угле сдвига $\gamma = 0.085$ rad и порах разного радиуса в случае генерации в расчетной ячейке ударной волны.

самбль пор. Методика создания такой волны в рамках молекулярно-динамической модели представлена, например, в работе [14]. При этом стоит отметить, что для исключения разогрева расчетной ячейки используется процедура термостатирования.

Исследование показало, что создание в расчетной ячейке ударной волны приводит к уменьшению свободного объема за счет схлопывания пор, что достигается благодаря росту касательных напряжений, а не температуры как в случае, рассмотренном на рис. 6. Так на рис. 7 представлено изменение величины f при различных углах сдвига в случае создания ударной волны. Рост f при углах сдвига 0.075 и 0.085 rad обусловлен схлопыванием малой поры (радиус $2a_0$) через 11 и 6.25 ps соответственно.

Структурный анализ расчетной ячейки показал, что волна инициирует более интенсивное развитие дислокационных петель сдвига (см. рис. 8, a), по сравнению с ранее проведенными модельными экспериментами (см. для сравнения рис. 7). При этом после схлопывания поры в расчетной ячейке продолжают структурные перестройки и формируются дислокации Ломер-Коттрелла (см. рис. 8, b).

4. Заключение

Проведенное исследование показало, что одним из основных механизмов залечивания пор, расположенных в непосредственной близости друг от друга, является формирование охватывающей эти поры дислокационной петли, которая возникает в результате взаимодействия отдельных петель, зарождающихся на поверхностях пор,

под воздействием сдвиговой деформации. Кроме того, образование подобной петли под воздействием ударной волны может приводить к схлопыванию отдельных пор даже при температурах, недостаточных для начала активизации диффузионных процессов.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] В.Л. Орлов, А.Г. Малышкина, А.В. Орлов. Изв. Томского политехнического ун-та. **305**, 3, 314 (2002).
- [2] П.Н. Остапчук. Вопросы атомной науки и техники **2**, 9 (2012).
- [3] Q. Xu, W. Li, J. Zhou, Y. Yin, H. Nan, X. Feng. Comput. Mater. Sci. **171**, 109280 (2020).
- [4] Y.-L. Guan, J.-L. Shao, W. Song. Comput. Mater. Sci. **161**, 385 (2019).
- [5] C.J. Ruestes, E.M. Bringa, A. Stukowski, J.F. Rodriguez Nieva, Y. Tang, M.A. Meyers. Comput. Mater. Sci. **88**, 92 (2014).
- [6] Я.Е. Гегузин, В.Г. Кононенко, В.Т. Чан. Порошковая металлургия **2**, 26 (1976).
- [7] Я.Е. Гегузин, В.Г. Кононенко. Физика и химия обработки материалов **2**, 60 (1982).
- [8] А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, Д.А. Лубяной, В.Н. Липунов. ЖЭТФ **156**, 6, 1078 (2019).
- [9] А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Д.А. Лубяной, П.В. Захаров, В.Н. Липунов. Изв. вузов. Черная металлургия. **64**, 6, 427 (2021).
- [10] R.A. Johnson. Phys. Rev. B **39**, 17, 12554 (1989).
- [11] A. Stukowski. Mod. Simul Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2010).
- [12] A. Stukowski, K. Albe. Mod. Simul Mater. Sci. Eng. **18**, 8, 085001 (2010).
- [13] A. Stukowski. JOM **66**, 3, 399 (2014).
- [14] А.В. Маркидонов, П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, Н.Н. Медведев. Механизмы кооперативного поведения атомов в кристаллах. Новокузнецк (2016). 220 с.
- [15] M.D. Starostenkov, A.V. Markidonov, P.V. Zakharov, P.Y. Tabakov. Met. Mater. Res. Foundations **63**, 184 (2019).
- [16] М.Д. Старостенков, А.В. Маркидонов, П.Я. Табаков. Деформация и разрушение материалов **6**, 2 (2016).

Редактор Т.Н. Василевская