

5.1

## **Молекулярно-динамическое исследование зарождения процесса локализации деформации в поверхностных слоях материала на наномасштабном уровне**

© А.И. Дмитриев, С.Г. Псахье

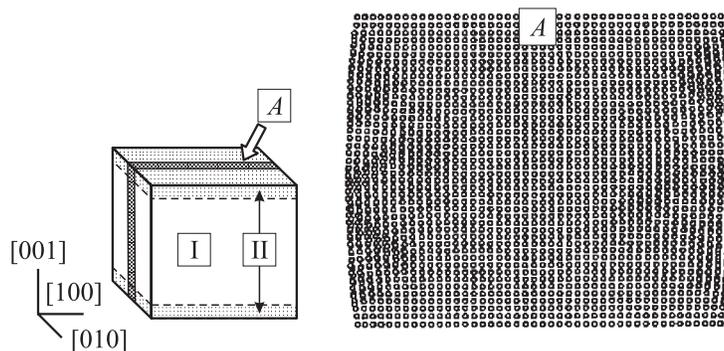
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск  
E-mail: dmitr@usgroups.com

Поступило в Редакцию 2 декабря 2004 г.

Исследуется роль поверхностного слоя в развитии пластической деформации на наноструктурном уровне в условиях динамического нагружения. Исследования проведены на основе компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. Показано, что начало процесса локализации деформации непосредственно связано с потерей структурной устойчивости в поверхностных слоях, формированием зон локализации на поверхности и их распространением в глубь материала. Этому предшествуют рассогласованные смещения атомов в приповерхностных областях. Полученные результаты согласуются с известными экспериментальными данными и наглядно подтверждают особую роль поверхностного слоя в формировании и развитии процессов пластической деформации материалов.

Исключительная роль поверхности как особого состояния твердого тела широко обсуждается во многих приложениях современного материаловедения [1,2], но ее принципиально важная роль в развитии процессов пластической деформации впервые была обоснована в рамках физической мезомеханики. Так, в работах [3–5] показано, что поверхностный слой является самостоятельным уровнем пластической деформации и играет важную роль в механическом поведении деформируемого твердого тела как целого. Особо следует отметить, что роль поверхности обусловлена не только ее исходной дефектностью или влиянием окружающей среды, но и пониженной сдвиговой устойчивостью поверхностных слоев [5].

Первичное зарождение деформационных процессов в настоящее время активно исследуется на основе современных экспериментальных



**Рис. 1.** Структура фрагмента „А“ моделируемого кристаллита при деформации  $\varepsilon = 12.5\%$ . Толщина фрагмента составляет три межплоскостных расстояния.

методик, в частности, с использованием сканирующей туннельной, атомно-силовой, растровой электронной микроскопии [6,7]. Тем не менее изучение начальной фазы процесса локализации деформации остается не исследованным, поскольку требует недостижимо высокого сочетания временного ( $10^{-9}$  s) и пространственного ( $10^{-10}$  m) разрешения. Это обуславливает значительный интерес к моделированию на атомном уровне элементарных процессов, связанных с зарождением и развитием пластической деформации в поверхностных слоях твердого тела.

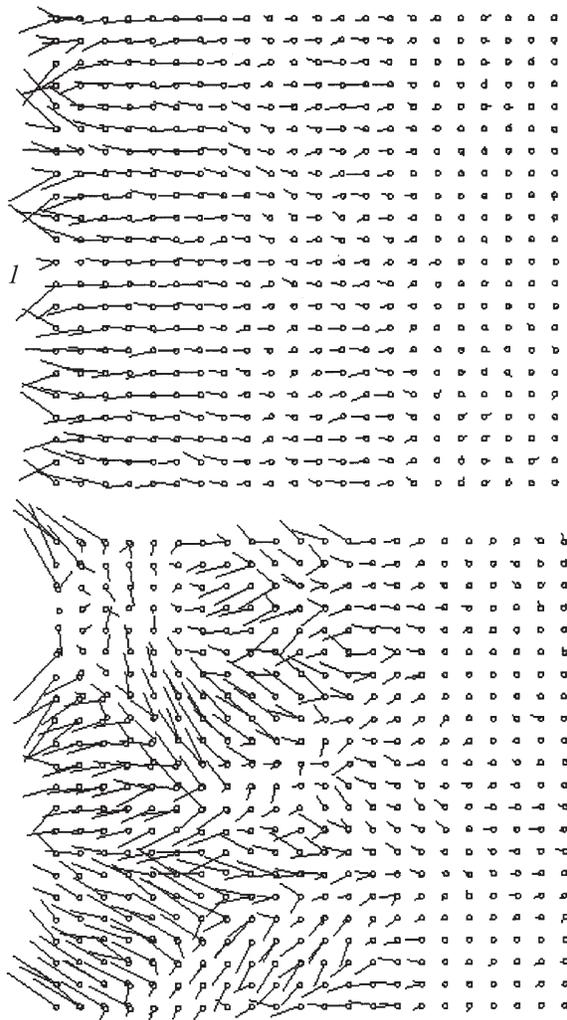
В силу вышесказанного поставленная в настоящей работе задача молекулярно-динамического изучения элементарных актов пластической деформации материала вблизи свободной поверхности является актуальной с точки зрения не только развития фундаментальных представлений о закономерностях зарождения и пластической деформации на наноструктурном уровне, но и возможных практических приложений.

Схематическое изображение моделируемого кристаллита показано на рис. 1, где I — деформируемая область, а II — области, имитирующие внешнюю нагрузку. В настоящей работе для них использованы так называемые струнные (string) граничные условия [8], а именно в направлении [001] проекции скоростей фиксировались и задавались равными  $-50$  и  $50$  m/s соответственно. Тем самым имитировалось динамическое сжатие. Данный тип граничных условий обладает определенными пре-

имуществами по сравнению, например, с жесткими, поскольку поведение атомов в направлениях, отличных от  $[001]$ , не является заданным, а определяется атомным окружением. Для учета протяженности моделируемого фрагмента в направлении  $[010]$  использовались периодические граничные условия. В направлении  $[100]$  моделировались свободные границы. Межатомные взаимодействия описывались в рамках метода погруженного атома [9]. Для избежания наведенных эффектов, связанных с симметрией идеальной решетки, кристаллит меди нагревался до температуры 20 К. Динамическое нагружение задавалось после релаксации исходной структуры при данной температуре, что позволяло получать равновесную атомную конфигурацию в поверхностных слоях.

Как показали результаты моделирования, при достижении определенной степени деформации наблюдается формирование и развитие полос локализации деформации. Детальный анализ показал, что их зарождение происходит на свободной поверхности. При этом источники зарождения полос локализации деформации находятся в зонах концентраторов напряжений, а именно в серединной части свободных поверхностей, что обусловлено режимом нагружения и геометрией кристаллита, и в зонах контакта деформируемой области с областями II. Это хорошо видно на рис. 1, где показана структура фрагмента моделируемого кристаллита в момент времени, соответствующий началу процесса формирования полос локализации деформации. Видно, что локализация деформации, зарождающаяся на поверхностях, затем распространяется в глубь материала.

На рис. 2 показаны смещения атомов за одинаковый временной интервал при различных степенях деформации в плоскости, параллельной плоскости  $(001)$ , расположенной в центральной части деформируемой области I расчетной ячейки. Толщина выделенного фрагмента в направлении  $[001]$  составляет две атомные плоскости. Для наглядности изображения отрезки, соответствующие атомным смещениям, увеличены в 10 раз. Отметим, что на начальной стадии нагружения смещения атомов носят согласованный характер и ориентированы из объема материала к свободной поверхности. Учет конечной температуры вносит определенный разброс в направления смещений, но в целом не меняет общей картины согласованных перемещений. Непосредственно на стадии, предшествующей зарождению полос локализации деформации, в поверхностном слое наблюдается заметная разориентация атомных смещений (рис. 2, a), что свидетельствует о неустойчивости



**Рис. 2.** Смещения атомов за одинаковый интервал времени при степенях деформации 11 и 12.5%. *I* — свободная поверхность.

атомных конфигураций в приповерхностной области. При этом модули смещений атомов на поверхности существенно (до 10 раз) превосходят модули смещений атомов в объеме материала. Очевидно, что изменение атомной структуры только в приповерхностных областях не может обеспечивать дальнейшей диссипации энергии. Это с неизбежностью приводит к вовлечению объемных областей в этот процесс, что хорошо видно на рис. 2, *b*. Таким образом, сформировавшись на поверхности, относительно большие атомные смещения затем распространяются в объем материала в виде полос локализованной деформации.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта президента РФ № НШ–2324.2003.1, гранта МО РФ № PD02–1.5–425 и гранта CRDF (TO–016–02).

## Список литературы

- [1] *Eshelby J.D.* Boundary problems. Amsterdam: Noth-Holland Publ., 1979. 167 p.
- [2] *Алехин В.П.* Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов. М.: Наука, 1983. 280 с.
- [3] *Papin V.E.* // Theor. and Appl. Frac. Mech. 2001. V. 37. P. 261–298.
- [4] *Панин В.Е.* // Физ. мезомех. 2000. Т. 4. № 3. С. 5–22.
- [5] *Панин В.Е., Фомин В.М., Титов В.М.* // Физ. мезомех. 2003. Т. 6. № 2. С. 5–14.
- [6] *Панин А.В., Клименов В.А., Абрамовская Н.Л.* и др. // Физ. мезомех. 2000. Т. 3. № 1. С. 83–92.
- [7] *Веттегрень В.И., Рахимов С.Ш., Светлов В.Н.* // ФТТ. 1998. № 12. С. 2180–2183.
- [8] *Мелькер А.И., Михайлин А.И., Байгузин Е.Я.* // ФММ. 1987. Т. 64. № 6. С. 1066–1070.
- [9] *Русина Г.Г., Берч А.В., Складнева И.Ю.* и др. // ФТТ. 1996. Т. 38. № 4. С. 1120–1141.