

01;05
©1994

ВИХРЕВОЙ МЕХАНИЗМ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН. КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

*С.Г.Псахье, С.Ю.Коростелев,
С.И.Негрескул, К.П.Зольников,
Ж.Ванг, Ш.Ли*

Исследование поведения механизмов релаксации границ зерен в металлах и сплавах при различных условиях нагружения является важной проблемой материаловедения. Изучение этой проблемы — очень сложная задача, и она обычно включает в себя как теоретическое, так и экспериментальное исследования.

Теоретические работы по данной тематике чаще всего проводятся на основе метода молекулярной динамики. Этот метод успешно использовался ранее для изучения структуры границ зерен [1,2]. Более того, метод молекулярной динамики позволяет моделировать релаксацию атомной структуры при нагружениях [2,3]. Это является очень важным, потому что структура границ зерен определяет многие свойства материала [1,4,5].

Реальные межзеренные границы являются двумерными фазами, имеющими сложную структуру, в которой атомы расположены в узлах неидеальной решетки. Как было показано в работе [6], при сдвиговом нагружении может произойти делокализация межузельных внедренных атомов. В случае границ зерен это будет означать утерю структурной стабильности и может оказать существенное влияние на механические свойства материала. Поэтому в настоящей работе проведено исследование поведения границ зерен на атомном уровне при сдвиговом нагружении. Моделирование проводилось для кристаллита Al, содержащего границу зерна типа $\Sigma 7$.

В настоящей работе при моделировании кристаллита Al координатные оси были направлены следующим образом: ось OZ — вдоль направления $\langle 111 \rangle$, ось OY — вдоль направления $\langle 2\bar{1}\bar{1} \rangle$, ось OX — вдоль направления $\langle 01\bar{1} \rangle$, а граница зерен располагалась перпендикулярно оси OX . Сдвиговая деформация описывалась специальными граничными условиями, такими же, как и в работах [6,7], в направлениях, перпендикулярных к плоскости XY . Скорость сдвига задавалась равной 10^{-4} атомных единиц (при микроскопических

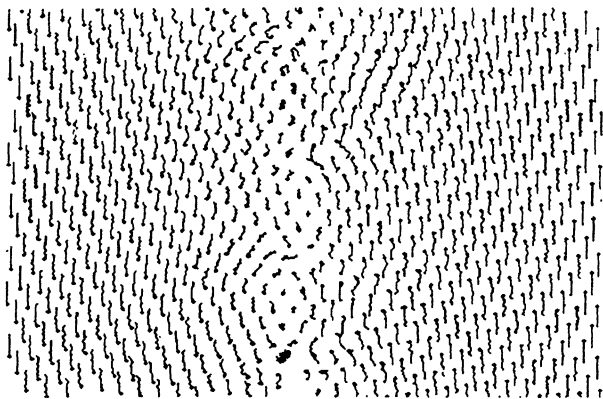


Рис. 1. Проекция атомных траекторий на плоскость XU для временного интервала $0 < t < 80\ 000$ ат.ед.

расчетах атомная система единиц является весьма удобной [8]).

Для проведения вышеуказанных расчетов использовался программный продукт MONSTER-MD. Межатомный эффективный потенциал рассчитывался на основе псевдопотенциальной теории [8] с использованием модельного псевдопотенциала Красно-Гурского [9], а эффекты обмена и корреляции в диэлектрической функции описывались в приближении Гелдарта-Воско [10].

Используемый потенциал межатомного взаимодействия хорошо описывал фононный спектр, энергию образования вакансии, энергию связи вакансии — атом примеси и многие другие термодинамические свойства чистого Al [11,12].

В данной работе был произведен анализ атомных траекторий, полученных на основе компьютерных экспериментов. Анализ показал, что деформационные процессы в области границ зерен приводят к образованию микровихревой структуры. Средний размер микровихрей не превышает пяти межатомных расстояний в диаметре. Анализ взаимного расположения микровихрей в направлении нормали к их плоскости может быть сделан с помощью проекции атомных траекторий трех основных плотноупакованных атомных плоскостей на плоскость XU . Результат такой проекции приведен на рис. 1. Из данного рисунка видно, что при сдвиговом нагружении кристаллита в области границ зерен образуются вихревые нити, обуславливающие диссипацию подводимой к кристаллиту энергии.

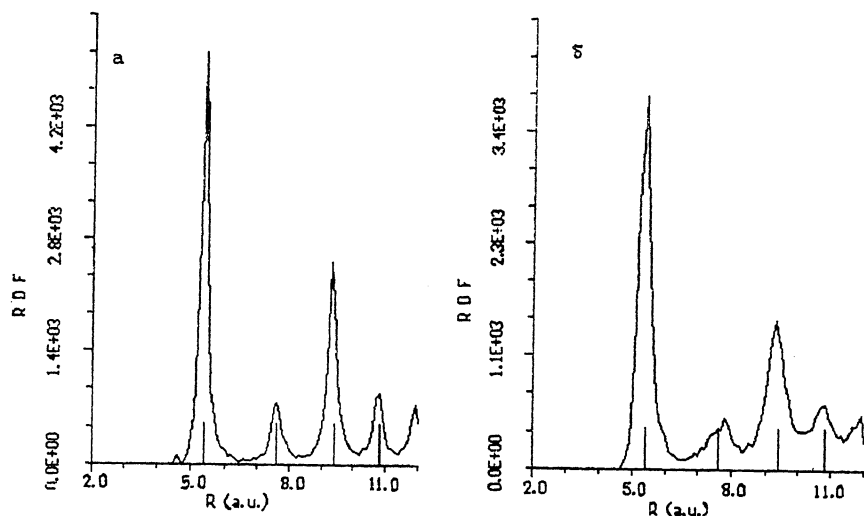


Рис. 2. Функции радиального распределения для межзеренной области. *a* — до сдвиговой деформации, *б* — после приложения сдвиговой деформации.

Отметим, что вихревой характер пластической деформации на различных структурных уровнях был предсказан ранее в работах [13,14].

Расчеты показали, что вихревой характер процесса деформации не приводит к каким-либо качественным изменениям функции радиального распределения (рис. 2). Следовательно, вихревые нити являются динамическими дефектами и их обнаружение на основе методов структурного анализа является очень сложной проблемой.

Таким образом, результаты, полученные в настоящей работе, позволяющие лучше понять механизмы пластической деформации, которая может сопровождаться появлением вихревых нитей в области межзеренной границы. В частности, это означает, что при сдвиговом нагружении характер взаимодействия межзеренной границы с другими дефектами (точечными, линейными, планарными, объемными) может иметь более сложную природу, чем это ранее считалось.

Полученные результаты представляют интерес как при теоретическом, так и при экспериментальном исследовании поведения металлов и сплавов в условиях высокоскоростного нагружения и, в частности, при конструировании новых материалов с неоднородной структурой.

Авторы данной работы выражают благодарность фирме **Monster Computer Program** за возможность использовать пакет вычислительных программ "Monster-MD".

Список литературы

- [1] Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н. // Границы зерен в металлах. М.: Металлургия, 1980. 156 с.
- [2] Greenspan D.J. // Phys. Chem. Solids. 1989. V. 50. N 12. P. 1245-1249.
- [3] Korostelev S.Yu., Psakhie S.G., Panin V.E. // Phys. Stat. Sol. (b). 1988. V. 148. P. 484-488.
- [4] Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. М.: Металлургия, 1987. 214 с.
- [5] Chandra-Holm H., Embury J.D. Yield Flow and Fracture of Polycrystals. Appl. Sci. London, 1983. 275 p.
- [6] Psakhie S.G., Alekseev S.V., Panin V.E. // Phys. Stat. Sol. (b). 1989. V. 153. P. k11-k14.
- [7] Alekseev S.V., Psakhie S.G., Panin V.E. // Phys. Stat. Sol. (b). 1991. V. 168. P. k1-k4.
- [8] Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М.: Мир, 1968. 336 с.
- [9] Краско Г.Л., Гурский З.А. // Письма в ЖЭТФ. 1969. Т. 9. В. 10. С. 596-601.
- [10] Geldart D.J.W., Vosko S.H. // Can. J. Phys. 1966. N 20. P. 2137-2171.
- [11] Псагье С.Г., Панин В.Е., Чулков Е.В. // Изв. вузов. Физика. 1980. В. 6. С. 99-104.
- [12] Панин В.Е., Псагье С.Г., Ланда А.И. // Изв. вузов. Физика. 1982. В. 12. С. 95-102.
- [13] Панин В.Е. // Изв. вузов. Физика. 1990. В. 2. С. 4-15.
- [14] Панин В.Е. // Изв. вузов. Физика. 1992. В. 4. С. 5-18.

Институт физики
прочности и материаловедения
СО РАН
Томск

Поступило в Редакцию
30 сентября 1993 г.
