

01;05

Влияние границы зерна на характер откольного разрушения в кристаллите меди при импульсном воздействии

© К.П. Зольников, Т.Ю. Уваров, В.А. Скрипняк, А.Г. Липницкий,
Д.Ю. Сараев, С.Г. Псахье

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Поступило в Редакцию 3 декабря 1999 г.

Проведено компьютерное моделирование откольного разрушения в кристаллите меди, содержащем границу зерна, при импульсном нагружении. Показано, что при инициировании в материале пакетов из нескольких уединенных импульсов сжатия усиливается тенденция на разрушение материала вдоль границы зерна.

Изучение явления откольного разрушения в условиях высокоэнергетического воздействия представляет актуальную задачу, поскольку позволяет глубже понять природу происходящих при этом процессов и прогнозировать поведение материалов в экстремальных условиях [1–3]. Для изучения откольного разрушения широко применяются компьютерные методы моделирования этого явления [4–6]. Результаты моделирования показали, что импульсное высокоэнергетическое воздействие на кристаллическую решетку может привести к формированию в материале пакета уединенных импульсов сжатия (УИС). В частности, было показано, что импульсное нагружение материалов с кристаллической структурой (высокоскоростное механическое нагружение, быстрый локальный разогрев свободной поверхности электронными пучками и т.д.) может приводить к формированию УИС, схожих по своим свойствам с солитонами [7–9]. Было показано, что амплитуда УИС в зависимости от кристаллографического направления может увеличиваться в 1.5–2 раза на свободной поверхности, а после отражения от нее часть его энергии рассеивается в приповерхностной области [10].

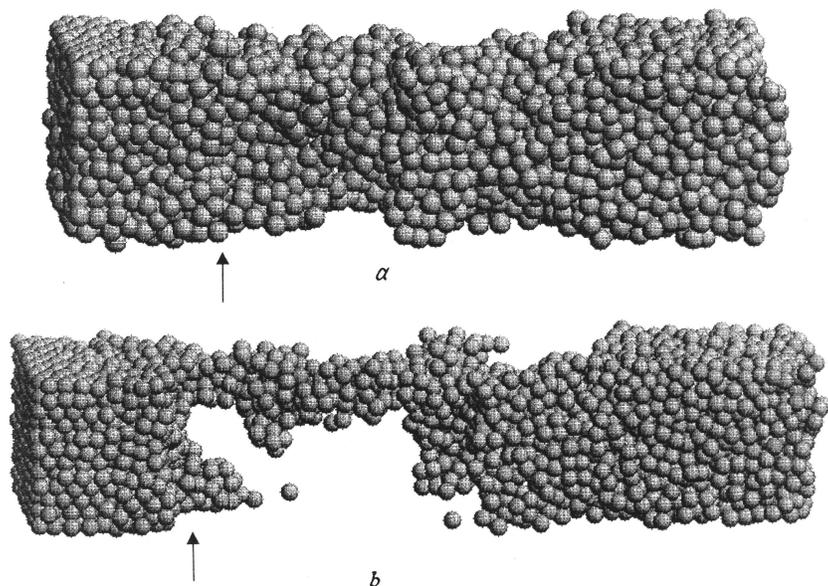


Рис. 1. Динамика откольного разрушения кристаллита меди (фрагмент образца). Стрелкой показана граница зерна.

Цель настоящей работы состояла в выяснении влияния межзеренной границы, расположенной вблизи свободной поверхности, на характер откольного разрушения при нагружении кристаллической решетки пакетом из нескольких УИС большой амплитуды.

На основе метода молекулярной динамики [7,8,11], в котором межатомные взаимодействия описывались в рамках метода погруженного атома [12–15], проведено моделирование импульсного нагружения кристаллической меди. Моделируемые кристаллиты содержали более 12 000 атомов и состояли из двух зерен с идеальной ГЦК структурой, имеющих относительный поворот вокруг оси [111] на 38.21° (граница специального типа $\Sigma 7$). Межзеренная граница ориентировалась параллельно свободной поверхности и была удалена от нее на 24 межплоскостных расстояния. Со стороны нагружаемой поверхности задавалось жесткое граничное условие, а с противоположной стороны —

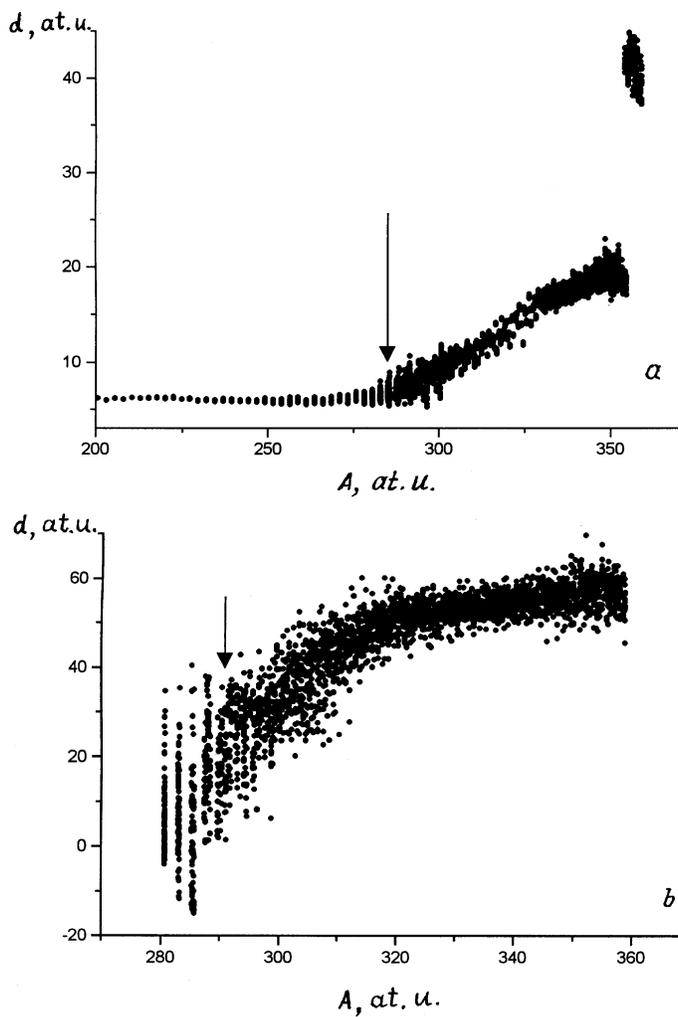


Рис. 2. Смещения атомов кристаллита меди (d) при нагружении пакетами из двух (a) и четырех (b) уединенных импульсов сжатия (A — координаты атомов).

свободная поверхность. Вдоль направлений, перпендикулярных направлению приложения нагрузки, использовались периодические граничные условия. Для моделирования внешнего нагружения атомам в выделенной области материала задавался определенный набор скоростей таким образом, чтобы их направление и распространение формирующихся УИС было перпендикулярно границе зерна и свободной поверхности.

Результаты моделирования показали, что выход УИС на тыльную поверхность может привести к откольному разрушению материала на наноскопическом масштабном уровне, характер которого определяется структурой самого материала, наличием в нем межзеренных границ и количеством УИС, сформированных при импульсном нагружении. При прохождении пакета из двух УИС с амплитудами 3300 m/s через межзеренную границу, описанную выше, формируется зона откольного разрушения вдоль этой границы, но этого воздействия еще недостаточно для полного разделения кристаллических областей. В то же время взаимодействие пакета из четырех УИС такой же амплитуды с межзеренной границей приводит к разрушению моделируемого образца вдоль нее. Кинетика разрушения для этого случая представлена на рис. 1. Из рисунка видно, что происходит отрыв второго зерна от образца. Расчеты показывают, что отколовшаяся часть по своим размерам значительно (примерно в 5 раз) превосходит размер отколовшихся фрагментов в идеальном кристалле при таком же нагружении.

Сравнительный анализ изменений структуры кристаллических областей при воздействии пакетов из двух и четырех УИС показывает существенные различия. В первом случае происходят откол части второго зерна от тыльной поверхности и растяжение материала по межзеренной границе (рис. 2), а во втором — материал разрушается вдоль самой границы. Следует отметить, что структура в отколовшемся зерне претерпевает характерные изменения. Так, часть зерна, прилегающая к тыльной поверхности, практически сохранила свою структуру, а вблизи зернограницной области материал растягивается (рис. 2). Такое поведение моделируемого кристаллита обусловлено характером взаимодействия пакета из УИС с межзеренной границей. Расчеты показали, что при последовательном прохождении УИС из пакета через межзеренную границу их энергия уменьшается, при этом каждый последующий теряет все большую долю переносимой им энергии, которая расходуется на разогрев и растяжение межзеренной области.

Результаты моделирования показывают образование значительного разброса в скоростях атомов у отколовшейся части по сравнению с образцом без границы при аналогичном нагружении. Ввиду нарастающего во времени отклонения скоростей атомов от среднего значения (500 m/s) существует тенденция к тому, что отколовшаяся часть распадется на более мелкие фрагменты.

На основании расчетов, проведенных в настоящей работе, можно сделать заключение, что при нагружении поликристаллической меди пакетами УИС имеется тенденция к разрушению кристаллита вдоль межзеренных границ. Увеличение числа УИС в пакете приводит к откольному разрушению вдоль границ, удаленных на большее расстояние от свободной поверхности. Отколовшиеся фрагменты со временем распадаются на более мелкие ввиду нарастающего разброса атомных скоростей.

Список литературы

- [1] Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
- [2] Никифоровский В.С., Шемякин Е.И. Динамическое разрушение твердых тел. Новосибирск: Наука, 1979.
- [3] Бушман А.В., Канель Г.И., Ни А.Л., Фортон В.Е. Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий. М., Черноголовка, 1988.
- [4] Seaman L., Curran D.R., Murr W.J. // Trans ASME J. Appl. Mech. 1985. V. 52. N 3. P. 593–600.
- [5] Curran D.R. // Shock Waves in Condensed Matter / Ed. by S.C. Schmidt, N.C. Holms. N.V.: Elsev. Sci. Publ. 1988. P. 321–326.
- [6] Зольников К.П., Уваров Т.Ю., Липницкий А.Г., Сараев Д.Ю., Псахье С.Г. // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 23. С. 22–27.
- [7] Псахье С.Г., Зольников К.П., Коростелев С.Ю. // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 13. С. 1–5.
- [8] Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю. // ФГВ. 1997. Т. 33. N 2. С. 43–46.
- [9] Зольников К.П., Кадыров Р.И., Наумов И.И., Псахье С.Г., Руденский Г.Е., Кузнецов В.М. // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 6. С. 12–16.
- [10] Псахье С.Г., Зольников К.П., Кадыров Р.И., Руденский Г.Е., Сараев Д.Ю. // ФГВ. 1999. Т. 35. N 4. С. 106–108.
- [11] Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю. // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 3. С. 42–46.

- [12] *Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S.* // Phys. Rev. 1986. V. B33. N 12. P. 7983–7991.
- [13] *Берч А.В., Липницкий А.Г., Чулков Е.В.* // Поверхность. 1994. № 6. С. 23–31.
- [14] *Eremeev S.V., Lipnitskii A.G., Potekaev A.I., Chulkov E.V.* // Physics of Low-Dimensional Structures. 1997. N3/4. P. 127–133.
- [15] *Русина Г.Г., Берч А.В., Скляднева И.Ю., Еремеев С.В., Липницкий А.Г., Чулков Е.В.* // ФТТ. 1996. Т. 38. N 4. С. 1120–1141.