

05

## **Молекулярно-динамическое исследование особенностей формирования динамических вихревых структур в материале с микропорами при высокоскоростной деформации**

© А.И. Дмитриев, С.Г. Псахье

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

Поступило в Редакцию 16 августа 2004 г.

Исследуется отклик материала с системой микропор на высокоскоростную сдвиговую деформацию. Исследования проведены на основе компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. Показано, что в процессе деформации такого материала формируются динамические дефекты вихревого типа. Этот процесс характеризуется тремя стадиями. Первая стадия связана с преимущественно ламинарным характером смещений атомов в областях, прилегающих к нагруженным слоям. Особенность второй стадии заключается в формировании согласованного вихреподобного движения атомов в области между микропорами. При этом наблюдается периодичность формирования и распада вихревого движения. Период такого процесса составляет порядка нескольких пикосекунд. Третья стадия связана с потерей устойчивости атомной структуры и формированием полос локализованной деформации. Это сопровождается рассогласованием вихревого движения атомов в области между микропорами. Полученные результаты могут иметь практическое приложение при анализе поведения материалов, подверженных радиационному облучению.

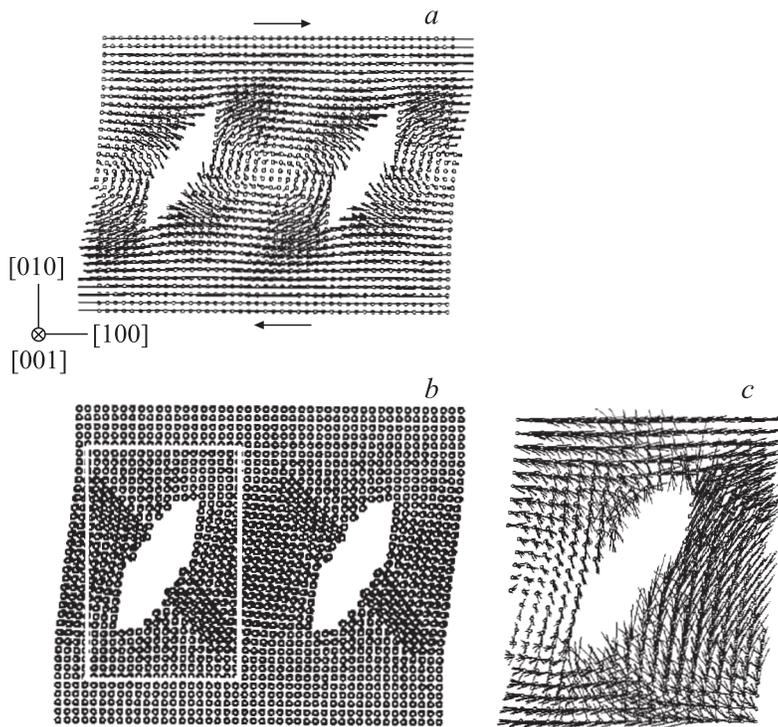
Использование методов компьютерного эксперимента при исследовании задач поведения материалов на наноуровне имеет большое теоретическое и прикладное значение, поскольку непосредственное (экспериментальное) изучение механизмов деформации атомного масштаба встречает значительные трудности ввиду не только малого пространственного разрешения, но и длительности процессов, сравнимой с дебаевскими временами. Известно, что наличие структурных неоднородностей в материале может приводить к реализации

механизмов деформации, связанных с формированием так называемых динамических дефектов [1–4]. Эти дефекты представляют собой согласованное вихреподобное движение достаточно большого числа атомов и существуют только на определенных этапах процесса нагружения, обеспечивая совместность атомных смещений. Следует отметить, что их возникновение, как правило, связано с особенностями внутренней структуры и спецификой нагружения.

С целью изучения возможности формирования динамических дефектов в материалах с микропорами в настоящей работе проведено исследование поведения трехмерного кристаллита меди в условиях динамического нагружения. Для этого использовался метод молекулярной динамики. Моделируемый кристаллит имел форму параллелепипеда, ребра которого были сонаправлены с кристаллографическими направлениями [100], [010] и [001]. Полное число атомов превышало 20 000, а размеры кристаллита в атомных единицах длины были равны соответственно 150, 120 и 80. Одна атомная единица длины соответствует приблизительно  $0.53 \cdot 10^{-10}$  м. Внешнее воздействие задавалось путем присвоения постоянных скоростей атомам, принадлежащим трем крайним атомным плоскостям с каждой из сторон вдоль направления [010]. В направлении [100] проекции скоростей задавались равными 25 м/с для верхнего слоя и  $-25$  м/с для нижнего слоя, а в остальных направлениях их скорости присваивались нулю. Тем самым моделировалась высокоскоростная сдвиговая деформация вдоль направления [100] с относительной скоростью 50 м/с. В направлении [100] использовались периодические граничные условия. В направлении [001] моделировались свободные границы. Заданные таким образом граничные условия имитировали сдвиговую деформацию кристаллита с системой микропор, вытянутого вдоль направления [100]. Межатомные взаимодействия описывались в рамках метода погруженного атома [5]. Для избежания наведенных эффектов, связанных с симметрией идеальной решетки, кристаллит меди нагревался до температуры 100 К. Динамическое нагружение прикладывалось после релаксации исходной структуры при указанной температуре.

Поведение атомной подсистемы анализировалось, в частности, на основе построения атомных конфигураций фрагмента в различные моменты времени, а также смещений атомов расчетной ячейки за различные интервалы времени.

Анализ результатов моделирования показал, что в процессе деформирования материала с системой микропор имеет место согласованное



*a* — смещения атомов моделируемого кристаллита в интервале времени  $(6.05-9.68) \cdot 10^{-12}$  s. Направление деформации отмечено стрелками, *b* — структура моделируемого кристаллита в момент времени  $12.09 \cdot 10^{-12}$  s, *c* — смещение атомов фрагмента моделируемого кристаллита (выделен рамкой на рисунке *b*) в интервале времени  $(10.89-14.51) \cdot 10^{-12}$  s. Величины смещений атомов для рисунков *a* и *c* увеличены в 5 раз.

вихревое движение атомов, которое может быть интерпретировано как формирование динамического дефекта. В рассмотренном случае поведение атомной подсистемы может быть условно разбито на три явно выраженные стадии.

На первой стадии наличие микропор не оказывает существенного влияния на поведение атомов, смещение которых носит в целом „ламинарный“ характер. Вторая стадия характеризуется согласованным

вихреподобным движением атомов в центральной области фрагмента, расположенного между микропорами. Проекция смещений атомов моделируемого кристаллита на плоскость [001], соответствующие второй стадии, показаны на рисунке, *a*. Следует отметить, что наличие микропор (внутренних поверхностей) облегчает возникновение „вихревой“ моды поведения атомов. Область, вовлеченная в такое движение, имеет характерный размер порядка 50 Å. В данных расчетах особенности геометрии моделируемого кристаллита приводят к тому, что „вихрь“ имеет вытянутую вдоль направления [100] форму, что хорошо видно на рисунке, *a*. Детальный анализ атомных смещений на второй стадии показал, что „вихревой“ характер движения атомов возникает и исчезает периодически. Время жизни таких согласованных движений атомов достигает нескольких пикосекунд. Интервалы между ними также находятся в диапазоне  $10^{-12}$  s. Величины атомных смещений в процессе „вихревого“ движения находятся в упругой области. Об этом также свидетельствует отсутствие структурных дефектов и сохранение сплошности материала. Такое периодическое возникновение „вихревого“ движения атомов может быть интерпретировано как динамический способ релаксации напряжений в сложной среде в упругой области. Этим может быть объяснена и периодичность такого процесса. Когда ресурсы упругого поведения материала исчерпаны, начинается третья стадия, которая характеризуется рассогласованием „вихревого“ движения атомов в области между микропорами. Детальный анализ структуры моделируемого кристаллита в моменты времени, соответствующие различным стадиям процесса деформации, показал, что начало третьей стадии совпадает с моментом формирования полос локализации деформации (см. рисунок, *b*). Следует отметить, что зарождение полос локализации деформации начинается со свободных поверхностей микропор. Моменту зарождения полос локализации деформации предшествует рассогласованность смещений атомов на внутренних поверхностях микропор (потеря устойчивости), что видно на рисунке, *c*, подобно тому, как это отмечается в работе [6] для внешней поверхности. Таким образом, на третьей стадии процесса деформации наблюдается перестройка атомной структуры, локализованная в области между микропорами.

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

## Список литературы

- [1] *Лихачев В.А., Волков А.Е., Шудегов В.Е.* Континуальная теория дефектов. Л.: Изд-во ЛГУ, 1986. 232 с.
- [2] *Psakhie S.G., Korostelev S.Yu., Negreskul S.I. et al.* // Phys. Stat. Sol. 1993. V. B176. P. K41–K44.
- [3] *Псахье С.Г., Зольников К.П.* // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 14. С. 43–48.
- [4] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 428 с.
- [5] *Daw M.S., Baskes M.I.* // Phys. Rev. 1984. V. B29. N 12. P. 6443–6453.
- [6] *Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов.* В 2 т. / Под ред. В.Е. Панина. Новосибирск: Наука, 1995. 297 с. и 320 с.