

05

О роли избыточного объема в нагруженном кристалле на стадии зарождения пластической деформации в приповерхностных областях

© А.И. Дмитриев, С.Г. Псахье

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

Поступило в Редакцию 21 февраля 2006 г.

Исследуется начальная стадия инициации процесса локализации атомных смещений в приповерхностной области на основе анализа особенностей перераспределения избыточного объема. Исследования проведены на основе компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. Показано, что избыточный объем концентрируется в тех областях, где в дальнейшем наблюдаются структурные изменения. При этом выявлено, что превышение избыточного объема для этих областей может достигать 5% по сравнению с удельным объемом, приходящимся на атомы, находящиеся вне зоны локализации смещений. Полученные результаты позволяют с новых позиций рассматривать роль избыточного объема в вопросах зарождения и развития пластической деформации на атомном уровне.

PACS: 62.20.Fe

Вопросы изучения закономерностей генерации и перераспределения избыточного объема в нагруженном материале, безусловно, являются актуальными задачами физики деформированного твердого тела, поскольку, как показано в работах [1,2], это может существенно менять характер отклика материала на различного рода динамические и термические воздействия. Это, в частности, важно для понимания процессов, реализующихся в условиях трибологического контакта, компактирования порошков, электронно-ионно-плазменной обработки поверхности и др. В общем случае избыточный объем определяется как отклонение реального атомного объема от его термодинамически равновесного значения. Согласно работе [3], где была показана возможность построения фазовых диаграмм в переменных $T-\Delta\Omega$ и $T-c_i-\Delta\Omega$

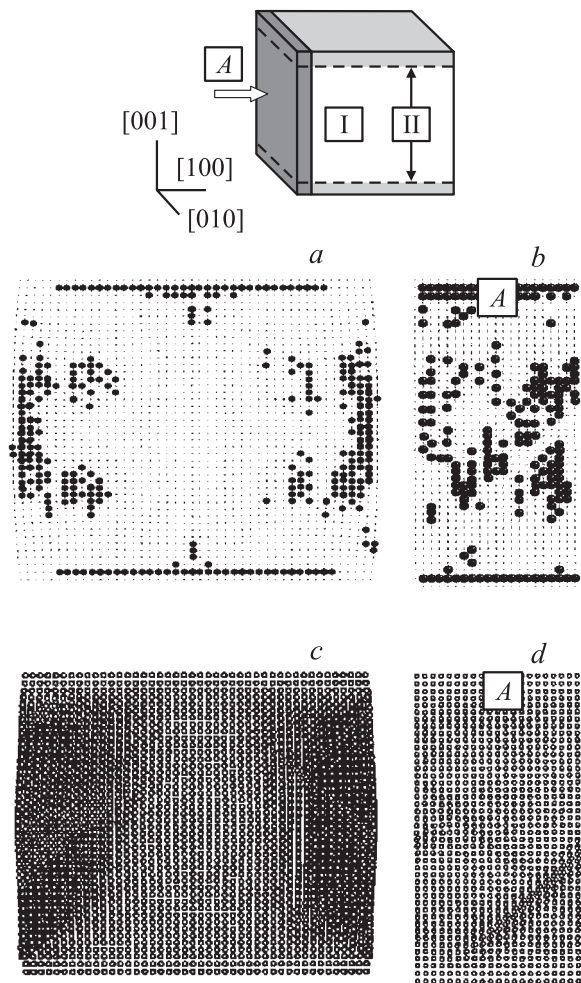
(T — температура, $\Delta\Omega$ — избыточный атомный объем, c_i — концентрация i -го компонента сплава), введение в систему дополнительного объема может приводить к состоянию сосуществования двух фаз, концентрация которых определяется по правилу Конод в соответствии с величиной введенного объема.

Отметим, что практически все структурные преобразования атомной решетки, в том числе и формирование так называемых прекурсорных состояний [4,5], неразрывно связаны с генерацией избыточного объема. Это объясняется дискретным строением вещества и, как следствие, формированием дополнительного объема при любой переупаковке атомов. Следует ожидать, что процессы зарождения и развития пластической деформации также связаны с перераспределением избыточного объема.

С этой целью в настоящей работе была поставлена задача молекулярно-динамического изучения возможных механизмов перераспределения избыточного объема в приповерхностной области на этапе, предшествующем зарождению пластической деформации и ее локализации. Данный вопрос является актуальным не только с точки зрения развития фундаментальных представлений о закономерностях зарождения и развития пластической деформации на наномасштабном уровне, но и с точки зрения возможных практических приложений.

В работе моделировалось динамическое сжатие кристаллита меди, схематическое изображение которого показано на схеме (см. рисунок), где I — деформируемая область, а II — области, имитирующие внешнюю нагрузку. В настоящей работе для них использовались струнные (string) граничные условия [6], когда в направлении [001] проекции скоростей задавались равными -50 и 50 m/s соответственно, а две другие проекции рассчитывались на основе решения системы уравнений движения. В направлении [010] моделировались периодические граничные условия, в направлении [100] — свободные границы. Межатомные взаимодействия описывались в рамках метода погруженного атома [7]. Уравнения движения интегрировались с шагом по времени $\Delta t \sim 2.42 \cdot 10^{-15}$ s. Полное число атомов превышало 21 000. Для избежания наведенных эффектов, связанных с симметрией идеальной решетки, кристаллит меди „нагревался“ до температуры 50 К. Динамическое нагружение задавалось после релаксации исходной структуры при данной температуре, что позволяло получать равновесную атомную конфигурацию в поверхностных слоях.

Для изучения вопроса распределения избыточного объема в кристаллической решетке в момент зарождения полос локализованных атомных



Проекция распределения удельного объема в момент времени $137 \cdot 10^3 \Delta t$:
a — кристаллита на плоскость (010); *b* — фрагмента „А“ на плоскость (100).
 Проекция структуры в момент времени $t = 145 \cdot 10^3 \Delta t$: *c* — кристаллита на
 плоскость (010); *d* — фрагмента „А“ на плоскость (100).

смещений и предшествующие ему моменты времени в работе использовалось следующее выражение для расчета удельного объема [8], приходящегося на отдельный атом:

$$V_i = \frac{1}{12\sqrt{2}} \sum_j r_{ij}^3. \quad (1)$$

В выражении (1) для расчета удельного объема ведется суммирование по ближайшим соседям выделенного атома i , после чего получившееся значение делится на число ближайших соседей 8.

Получаемые значения объема, приходящегося на отдельный атом, сравнивались со значением удельного объема в идеальной недеформированной ГЦК-решетке. Согласно проведенному анализу, стадия активного нагружения — динамического сжатия приводит к тому, что удельный объем в деформированной кристаллической решетке уменьшается по сравнению с идеальным значением. При этом наблюдается неравномерность распределения удельного атомного объема. Так, на рисунке, *a* показана проекция на плоскость (010) распределения удельного объема в кристаллической решетке на стадии релаксации до начала структурных изменений. На рисунке более крупными точками помечены атомы, избыточный объем которых превышает 5%. Хорошо видно, что избыточный объем концентрируется в тех областях, где в дальнейшем наблюдаются структурные изменения. Для сравнения на рисунке, *c* показана проекция на плоскость (010) структуры моделируемого кристаллита в момент формирования полос локализованных атомных смещений.

Аналогичные выводы могут быть получены из анализа распределения избыточного объема в приповерхностной области моделируемого кристалла. На рисунке, *b* показано распределение удельного объема до момента времени начала структурных преобразований во фрагменте „А“ толщиной три межплоскостных расстояния. Положение выделенного фрагмента „А“ в кристаллите отмечено на схеме темным цветом. Крупными точками также отмечены атомы, избыточный объем которых превышает 5%. Остальные атомы отмечены мелкими точками. Хорошо видно, что преимущественной ориентацией атомов с увеличенным удельным объемом являются направления $[0\bar{1}1]$ и перпендикулярные им $[011]$, что соответствует ориентации формирующихся в дальнейшем областей локализованных атомных смещений (см. рисунок, *d*).

Следует отметить, что в настоящих расчетах доля атомов на свободных поверхностях с учетом геометрии моделируемого кристал-

лита и используемых граничных условий составляла около 8%, что приводит к определяющей роли свободной поверхности в реализации обнаруженных механизмов на атомном уровне. В массивных же кристаллах общепринятым считается, что зарождение дислокаций на поверхности связано с поверхностными концентраторами напряжений в виде ступенек тех или иных размеров [9].

Таким образом, полученные результаты позволяют с новых позиций рассматривать роль избыточного объема в вопросах инициации механизмов структурных трансформаций на атомном уровне. В частности, генерация и распространение полос локализованных атомных смещений может быть рассмотрено в контексте способа перераспределения и транспорта избыточного объема.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта „Фонда содействия отечественной науке“, гранта CRDF (ТО-016-02), гранта РФФИ № 05-08-18138-а, гранта INTAS YS N 04-83-3544 и Интеграционного проекта СО РАН „Электронно-ионно-плазменные методы и физико-химические основы синтеза нанокристаллических и нанофазных поверхностных слоев и покрытий“.

Список литературы

- [1] *Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов* / Ю.Р. Колобов, Р.З. Валиев, Г.П. Грабовецкая и др. Новосибирск: Наука, 2001. 232 с.
- [2] *Бетехтин В.И., Глезер А.М., Кадомцев А.Г., Купяткова А.Ю.* // ФТТ. 1998. Т. 40. № 1. С. 85–89.
- [3] *Psakhie S.G., Korostelev S.Yu., Negreskul S.I., Zolnikov K.P., Wang Zh., Li Sh.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1993. V. 176. P. K41–K44.
- [4] *Полухин В.А.* Моделирование наноструктуры и прекурсорных состояний. Екатеринбург: УрО РАН, 2004. 208 с.
- [5] *Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Lipnitskii A.G.* // Phys. Letters A. 2006. V. 349. P. 509–512.
- [6] *Дмитриев А.И., Псахье С.Г.* // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. В. 16. С. 31–35.
- [7] *Daw M.S., Baskes M.I.* // Phys. Rev. 1984. V. B29. N 12. P. 6443–6453.
- [8] *Макклиток Ф., Аргон А.* Деформация и разрушение материалов. М.: Мир, 1970. 444 с.
- [9] *Мальгин Г.А.* // ФТТ. 2001. Т. 43. № 2. С. 248–253.