

05

## Молекулярно-динамическое изучение отклика бикристалла меди в условиях сдвигового нагружения

© А.И. Дмитриев, А.Ю. Никонов, С.Г. Псахье

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

Поступило в Редакцию 5 апреля 2010 г.

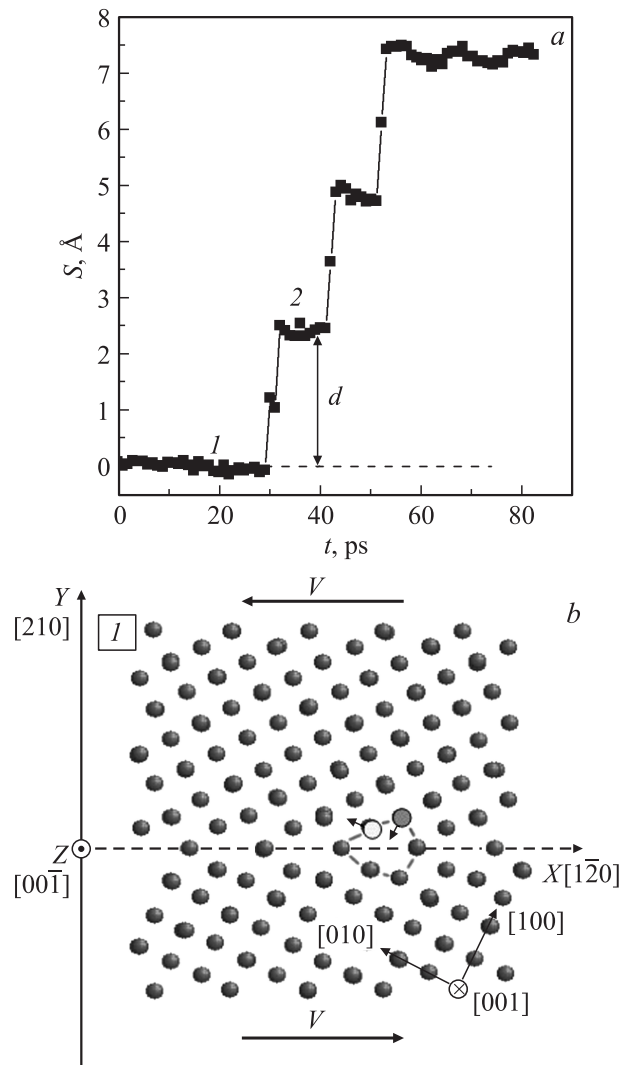
С помощью компьютерного моделирования исследовано поведение большеугловой границы зерен специального типа  $\Sigma = 5$  (210) [001] в бикристалле меди в условиях сдвигового нагружения. Обнаружено, что одновременно с относительным проскальзыванием зерен в направлении приложенной нагрузки происходит перемещение положения границы зерен в направлении, перпендикулярном действию сдвиговой деформации. Обнаруженное движение носит дискретный характер. Оно приводит к росту одного зерна за счет другого. В работе анализируется механизм такого перемещения, а также исследовано влияние скорости и направления нагружения на характер поведения границы зерен. Результаты исследований позволяют лучше понять атомные механизмы развития пластической деформации в поликристаллических материалах.

Поликристаллические материалы на металлической основе со сверхмелким зерном обладают целым рядом уникальных прочностных и технологических свойств. В настоящее время установлено, что необычно высокие механические свойства нанокристаллических материалов в основном обусловлены специфическими механизмами пластической деформации, тесно связанными с поведением границ зерен [1,2]. Этим объясняется, что поведению границы зерен в условиях приложенного напряжения посвящено большое число как экспериментальных, так и теоретических работ [3,4]. Отметим, что характерные масштабы изучаемых объектов сопоставимы с межатомными расстояниями, поэтому экспериментальное изучение поведения границ зерен требует наличия высокоточного и дорогостоящего измерительного оборудования. В последнее время с ростом производительности вычислительной техники этот вопрос все чаще изучается с использованием

методов компьютерного моделирования. Такие исследования позволяют детально проанализировать различные аспекты исследуемой проблемы и изучить механизмы структурного преобразования кристаллической решетки в динамике. К сожалению, атомистические механизмы, посредством которых происходит движение границы, по-прежнему далеки от полного понимания. Это в значительной степени обусловлено как сложностью структуры границы и возможностью ее модификации в ходе движения, так и динамикой самого процесса. Целью данной работы являлось изучение с помощью методов компьютерного моделирования особенностей поведения и механизмов движения большеугловых границ зерен специального типа в условиях внешнего сдвигового нагружения.

Исследования проводились с использованием метода молекулярной динамики [4,5]. Для расчетов был выбран программный пакет LAMMPS [6], позволяющий эффективно использовать возможность распараллеливания вычислений. В качестве объекта исследования был выбран бикристалл меди, состоящий из двух зерен и содержащий плоский дефект типа большеугловой границы зерен специального типа  $\Sigma = 5$  (210) [001]. Фрагмент исходной структуры бикристалла изображен на рис. 1, *b*. Нагружение задавалось путем присвоения краевым атомам, внешним по отношению к границе зерен, постоянных скоростей. Толщина нагружаемых слоев для каждого из зерен соответствовала двум радиусам обрезания потенциала межатомного взаимодействия, который описывался в рамках метода погруженного атома [5]. Выбор потенциала обусловлен возможностью с достаточно высокой степенью точности описывать упругие и поверхностные свойства, а также энергетические параметры дефектов данной системы. Уравнения движения интегрировались с шагом по времени  $\Delta t = 0.001$  ps. Полное число атомов превышало 200 000.

Вдоль плоскости границы зерна моделировались периодические граничные условия. Расстояние между нагружаемыми слоями и границей зерен составляло более 50 параметров решетки. Зерна бикристалла были ориентированы так, чтобы оси координат были направлены вдоль кристаллографических направлений, определяющих тип границы. Минимум энергии достигался за счет жесткого сдвига одного зерна относительно другого в плоскости границы и последующего сдвига в перпендикулярном направлении. В дальнейшем использовалась стандартная процедура достижения равновесной конфигурации систе-



**Рис. 1.** *a* — изменение Y-координаты положения границы зерен в зависимости от времени. *b, c* — структура центрального фрагмента моделируемого бикристалла на начальном и конечном этапах перестройки атомной конфигурации (см. 1 и 2 на временной зависимости).

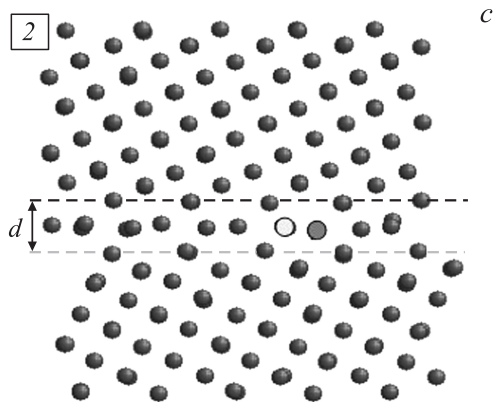


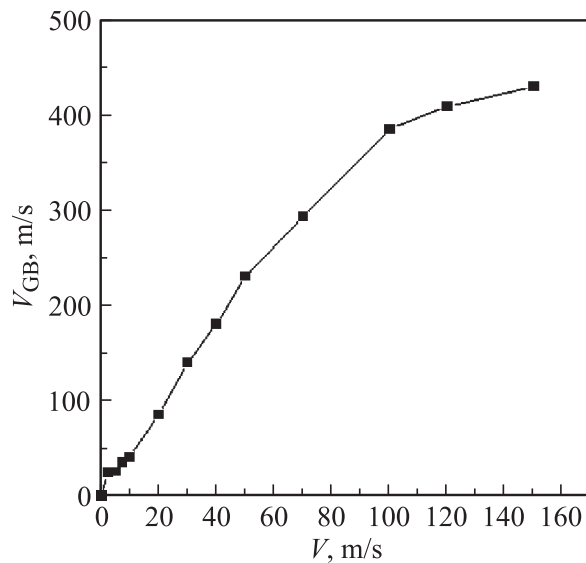
Рис. 1 (продолжение).

мы за счет сброса атомных скоростей при прохождении системой положения с минимальным значением потенциальной энергии. Рассчитанное, таким образом, удельное значение энергии границы зерен составило  $0.952 \text{ J/m}^2$ , что на 2% отличается от теоретического [5]. Во избежание наведенных эффектов, связанных с симметрией идеальной решетки, равновесный бикристалл „нагревался“ до температуры 100 К.

В работе проведено моделирование поведения границы зерен в условиях сдвигового нагружения с различной скоростью. Для этого атомы нагружаемого слоя двигались параллельно плоскости моделируемого дефекта с заданной скоростью, а в перпендикулярном направлении их смещения определялись на основе решения системы уравнений движения. Величина задаваемой скорости  $V$  в различных задачах варьировалась в диапазоне от 2 до 150 м/с. Согласно полученным результатам, поведение границы зерна специального типа  $\Sigma = 5 (210) [001]$ , подвергнутой такого рода внешнему воздействию, существенно зависит от направления приложенного нагружения. При ориентации внешнего сдвигового нагружения вдоль оси  $X$  (рис. 1,  $b$ ) наблюдается изменение положения границы зерен в направлении, перпендикулярном приложенным скоростям (в нашем случае вдоль оси  $Y$ ), приводя тем самым к росту одного из зерен поликристалла. Временная зависимость

$Y$ -координаты атомов в плоскости границы наглядно демонстрирует дискретный характер такого движения (рис. 1, *a*). Детальный анализ конфигурации атомной решетки вблизи границы зерен в различные моменты времени позволил выявить механизм перемещения границы в направлении, перпендикулярном приложенной нагрузке. На рис. 1, *c* показана структура атомов в области межзеренной границы в момент завершения одного такого перемещения. Первоначально вблизи границы идет накопление напряжений, вызванных сдвиговым нагружением. После достижения критического напряжения атомы, отмеченные темным кругом, начинают перемещаться по направлению приложенного сдвигового нагружения. Одновременно с этим происходит их смещение вниз в межузельное положение ячейки границы зерен (выделена пунктиром на рис. 1, *b*). Смещение сопровождается „выдавливанием“ атомов, выделенных светлым кругом, в направлении, отмеченном стрелкой. Отметим, что процесс „выдавливания“ облегчается со-направленным действием приложенного сдвигового напряжения. Результатом таких перемещений является единичный акт горизонтального относительного проскальзывания зерен, который сопровождается надстройкой атомных плоскостей одного из зерен (в нашем случае нижнего). Это, в свою очередь, приводит к эффективному перемещению границы зерен в перпендикулярном направлении. Очевидно, что направленность перпендикулярного движения границы зерен обусловлена отсутствием симметрии границы в плоскости  $Yoz$ . Поэтому следует ожидать, что смена направления нагружения должна привести к изменению направления движения границы, что и было подтверждено в дальнейшем результатами моделирования.

В ходе исследований было обнаружено, что при увеличении скорости движения атомов нагружаемого слоя происходит увеличение средней скорости перпендикулярного движения границы. Получено, что для границы типа  $\Sigma = 5$  (210) [001] средняя скорость движения границы зерен пропорциональна скорости нагрузки с коэффициентом  $k = 4.59$ . Однако при высокоскоростном нагружении (при скоростях свыше 100 м/с) увеличение скорости движения границы с ростом скорости нагружаемых слоев замедляется и выходит на некоторое предельное значение вблизи 500 м/с, что, по-видимому, связано с максимальной скоростью скольжения дислокаций. Получаемая зависимость представлена на рис. 2.



**Рис. 2.** Изменение средней скорости перемещения границы зерен в направлении, перпендикулярном сдвиговому нагружению, от величины скорости нагружения.

Описанный выше механизм перемещения границы зерен подтверждает одну из существующих гипотез, согласно которой движение границ зерен связано с кооперативным движением группы атомов [3,7]. По-видимому, такой механизм справедлив лишь для ограниченного числа специальных ситуаций (низкая температура, симметричные границы, сдвиговые нагружения). Справедливость выявленного механизма движения границы зерен для других границ и в случае сложной структуры границы требует дополнительных исследований.

В заключение отметим, что обнаруженное поведение границ зерен может оказывать существенное влияние на изменение микроструктуры материала и, как результат, на его свойства и особенности поведения. Результаты, полученные в настоящей работе, могут быть использованы для понимания особенностей развития пластической деформации в поликристаллах в условиях динамического нагружения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 09-08-00311-а, Программы фундаментальных исследований Отделения энергетики, машиностроения и процессов управления РАН 13.13.3 и интеграционного проекта СО РАН № 127 со сторонними организациями.

## Список литературы

- [1] *Малыгин Г.А.* // ФТТ. 2007. Т. 49. С. 961–982.
- [2] *Гуткин М.Ю., Микаелян К.Н., Овидько И.А.* // ФТТ. 2008. Т. 50. С. 1216–1229.
- [3] *Gorkaya T., Molodov D.A., Gottstein G.* // Acta Materialia. 2009. V. 57. P. 5396–5405.
- [4] *Zhang H., Srolovitz D.J.* // Acta Materialia. 2006. V. 54. P. 623–633.
- [5] *Zuzuki A., Mishin Y.* // Interface Sci. 2003. V. 11. N 1. P. 131–148.
- [6] *Plimpton S.J.* // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. P. 1–19.
- [7] *Babcock S.E., Balluffi R.W.* // Acta Metallurgica. 1989. V. 37. N 9. P. 2367–2376.