

05.1

Моделирование взаимодействия двух симметричных межзеренных границ в условиях сдвиговой деформации

© А.И. Дмитриев, А.Ю. Никонов

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

Поступило в Редакцию 22 апреля 2011 г.

С помощью компьютерного моделирования исследовано поведение двух большеугловых границ зерен специального типа $\Sigma = 5$ (210)[001] в поликристалле меди в условиях сдвигового нагружения. Обнаружено, что, как и в случае моделирования одной границы, одновременно с относительным проскальзыванием зерен в направлении приложенной нагрузки происходит перемещение положения межзеренных границ в направлении, перпендикулярном действию сдвиговой деформации. В работе анализируются особенности взаимодействия двух симметричных дефектов при их сближении. Результаты исследований позволяют лучше понять атомные механизмы развития пластической деформации в поликристаллических материалах.

Развитие пластической деформации поликристаллического материала сопровождается реализацией различных механизмов изменения атомной структуры. Зернограничное проскальзывание и миграция зерен являются основными факторами, ответственными за процессы рекристаллизации и роста зерен. Несмотря на важность этих процессов в микроструктурной эволюции, механизм движения границ до сих пор полностью не исследован. В последние годы этот вопрос все чаще решается с помощью методов компьютерного моделирования. Благодаря моделированию можно детально изучить локальную структуру границы и процессы, которые происходят при миграции границ зерен, в то время как экспериментальные исследования, например методы РСА, могут получить только усредненную картину изменения структуры.

Ранее с помощью компьютерного моделирования нами были выявлены особенности развития механизма зернограничного проскальзывания на уровне отдельных атомов на примере большеугловой гра-

ницы $\Sigma = 5(210)[001]$ [1]. В частности, при определенной ориентации плоского дефекта в условиях сдвигового нагружения зернограничное проскальзывание может сопровождаться перестройкой атомной конфигурации в области межзеренной границы, что приводит к эффективному перемещению положения границы в направлении, перпендикулярном приложенной нагрузке. При этом скорость перемещения дефекта может в несколько раз превосходить скорость нагружения. Важным результатом было также то, что при смене направления нагружения на противоположное граница меняет направление своего движения.

В работе [2] теоретически было показано, что в поликристалле при определенных условиях две границы зерен могут мигрировать навстречу друг другу и в результате их сближения либо может происходить процесс аннигиляции дефектов, либо они могут проходить друг сквозь друга. Нами было высказано предположение, что при моделировании двух параллельных границ зерен можно создать условия нагружения, при которых границы будут двигаться навстречу друг другу. Поэтому целью настоящей работы было, во-первых, проанализировать возможности такого движения, а во-вторых, методами компьютерного моделирования изучить особенности взаимодействия двух симметричных границ зерен специального типа при их сближении.

Исследования проводились в рамках метода молекулярной динамики. Моделировался поликристалл меди, содержащий два плоских дефекта типа большеугловой границы зерен специального типа $\Sigma = 5(210)[001]$, расположенных параллельно плоскости XoZ , как показано на рис. 1. Для генерации структуры, содержащей одну границу зерен $\Sigma = 5$, был использован алгоритм, описанный в работе [3]. Сначала часть монокристалла поворачивалась вокруг оси $[001]$ на определенный угол, а затем одно из зерен смещалось на вектор \mathbf{t} для достижения атомной конфигурации с минимумом потенциальной энергии. Третье зерно и второй дефект создавались аналогичным образом. При этом вектор сдвига для получения равновесной конфигурации со вторым дефектом совпадает с вектором сдвига при генерации первой границы. Таким образом, зерна 1 и 3 являются зеркальным отражением центрального зерна 2 относительно плоскости XoZ .

Взаимодействие атомов меди описывалось с помощью потенциала межатомного взаимодействия, рассчитанного в рамках метода погруженного атома [4]. Данный многочастичный потенциал хорошо зарекомендовал себя при решении различных задач описания дефор-

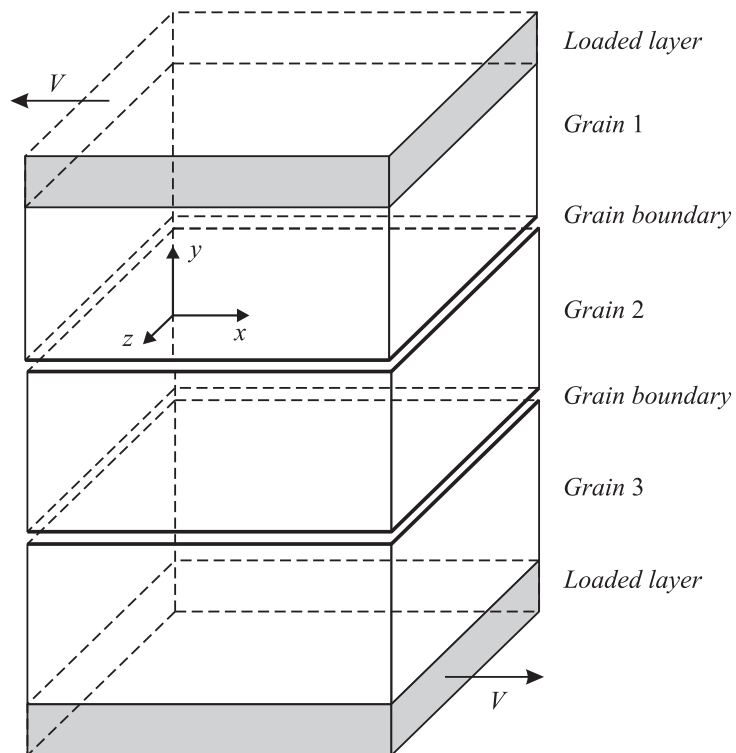


Рис. 1. Общий вид моделируемого образца, содержащего две границы зерен.

мации металлических кластеров и структур на кристаллической основе [5]. Расчет траектории движения атомов был выполнен с помощью молекулярно-динамического пакета LAMMPS [6], позволяющего эффективно использовать возможности параллельных вычислений. Размеры моделируемого поликристалла составляли $7.27 \times 16.97 \times 6.87$ nm. Оси координат были направлены вдоль кристаллографических направлений $[1\bar{2}0]$, $[210]$ и $[00\bar{1}]$ для центрального зерна, как показано на рис. 2, а. Вдоль осей X и Z моделировались периодические граничные условия. Нагружение задавалось путем присвоения краевым атомам зерен 1 и 3, внешним по отношению к границам, постоянных скоростей. Ширина нагружаемых слоев соответствовала двум радиусам обрезания меж-

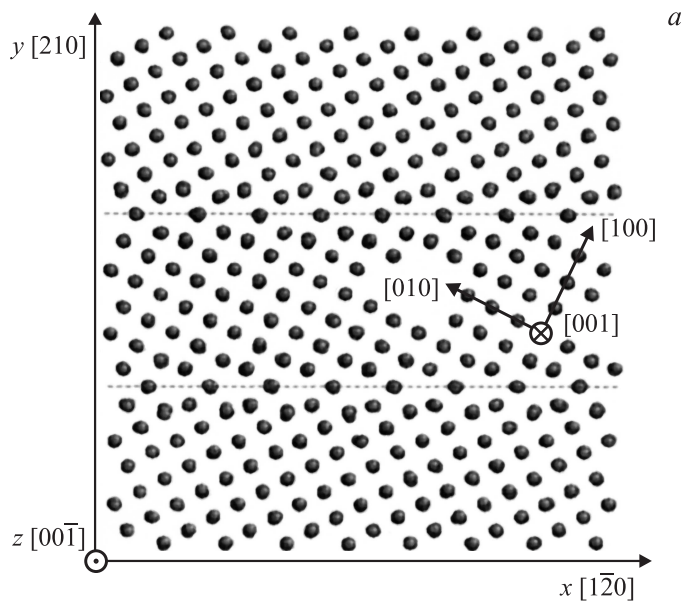


Рис. 2. *a* — структура центрального фрагмента моделируемого поликристалла в начальный момент времени, *b* — временные зависимости изменения Y -координат границ зерен.

атомного потенциала. Модули скоростей нагружения составляли 30 м/с для каждого нагружаемого слоя, а ветора скоростей были направлены противоположно друг другу вдоль оси X . Моделируемый поликристалл содержал более 71 000 атомов. Для того чтобы уменьшить влияние температурных колебаний атомов, моделирование проводилось при температуре образца 100 К. Начальное расстояние между границами $S = 5.694$ nm. Шаг интегрирования $\Delta t = 0.001$ ps.

Как было показано в работе [1], в условиях сдвиговой деформации проскальзывание межзеренной границы $\Sigma = 5$ может сопровождаться ее перемещением в направлении, перпендикулярном приложенной нагрузке (в нашем случае вдоль оси Y). Особенности такого движения зависят от типа дефекта, величины скорости нагружения и направления деформирования. Описанные выше условия нагружения определили динамику поведения двух моделируемых границ зерен таким образом,

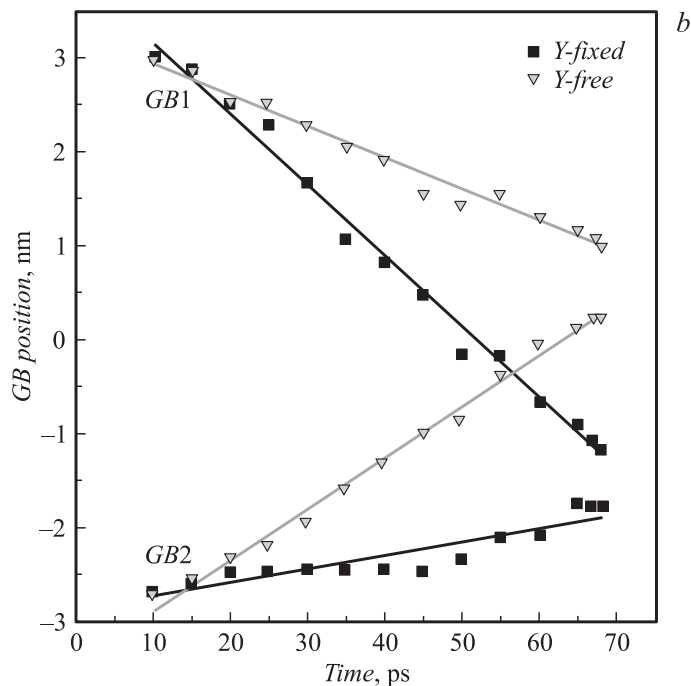


Рис. 2 (продолжение).

что их перемещение вдоль оси Y было направлено навстречу друг другу. Такое движение сопровождалось увеличением зерен 1 и 3 путем надстройки их атомных слоев за счет атомов центрального зерна.

Анализ структуры поликристалла в различные моменты времени показал, что подвижность границ также зависит от типа граничных условий, реализованных для атомов нагружаемых слоев. Так, если Y -координата атомов нагружаемых слоев фиксирована, то перемещение двух границ зерен в направлении, перпендикулярном приложенной нагрузке, происходит с близкими скоростями (-33.73 и 54.14 m/s). Подобная реализация граничных условий может быть интерпретирована как сдвиговая деформация в стесненных условиях. Если атомам нагружаемых слоев „разрешено“ перемещаться вдоль направления Y (реализация так называемых струнных граничных условий [7]), то ско-

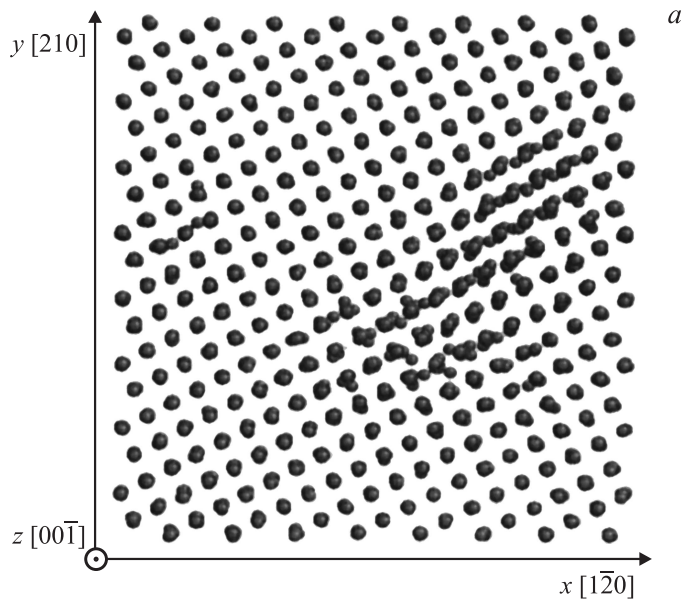


Рис. 3. *a* — результирующая структура центрального фрагмента моделируемого кристаллита после аннигиляции границ зерен, *b* — временные зависимости изменения удельной энергии и кинетической температуры системы.

рости перемещения границ вдоль оси Y отличаются (-75.53 и 14.46 м/с соответственно). Данный случай соответствует заданию сдвиговой деформации для протяженных зерен. Несмотря на различия в динамике поведения каждой границы зерен в отдельности для рассмотренных случаев нагружения, относительная скорость сближения дефектов в направлении оси Y остается практически неизменной: 87.87 и 89.99 м/с соответственно.

На рис. 2, *b* показаны временные зависимости изменения положения границ зерен вдоль оси Y для рассмотренных случаев. Видно, что процесс взаимодействия сближающихся дефектов происходит, когда расстояние между ними становится ~ 0.7 нм, что меньше двух радиусов обрезания потенциала. Результатом взаимодействия является полная аннигиляция центрального зерна 2 и объединение структуры зерен 1 и 3. На рис. 3, *a* показана результирующая структура моделируемого

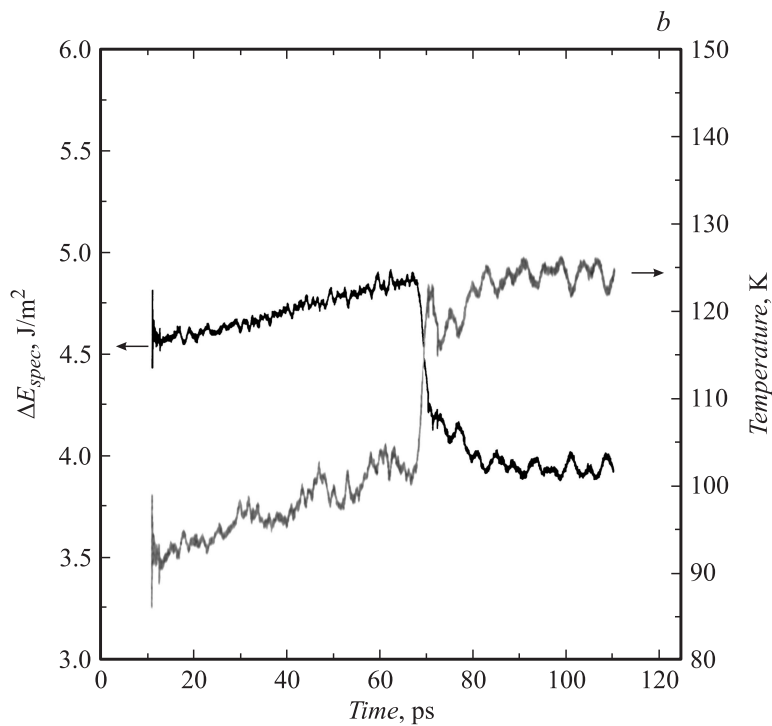


Рис. 3 (продолжение).

фрагмента после объединения структуры зерен 1 и 3 и последующей релаксации всей системы к новому равновесному состоянию. Видно, что за исключением небольших искажений, локализованных в области существования двух границ, атомная решетка восстанавливает идеальную конфигурацию.

Оценка энергетических параметров моделируемой системы показала, что процесс аннигиляции двух границ зерен сопровождается резким уменьшением потенциальной энергии кристалла и повышением кинетической температуры образца. На рис. 3, *b* представлены временные зависимости соответствующих величин. В качестве выводимого энергетического параметра используется разница текущего значения потенциальной энергии моделируемого кристалла и его энергии в ис-

ходном бездефектном состоянии при 0 К. Полученная величина делится на площадь кристалла в плоскости XoZ , параллельной плоскости границ зерен. Таким образом, скачок энергии при аннигиляции двух границ составляет $\Delta U \approx 0.95 \text{ J/m}^2$, что сопоставимо с величиной удельной энергии моделируемой границы зерен $U_{\Sigma 5} = 0.952 \text{ J/m}^2$ [8]. Соответственно такая же величина энергии $2U_{\Sigma 5} - \Delta U \approx 0.954 \text{ J/m}^2$ распределяется между оставшимися дефектами структуры $U_{def} \approx 0.31 \text{ J/m}^2$ при $T = 125 \text{ K}$ и энергией, обусловленной повышением температуры системы. Закалка остаточных дефектов структуры показала, что их удельная энергия при 10 К составляет $U_{def} \approx 0.24 \text{ J/m}^2$, т. е. около 12% от исходной энергии двух дефектов.

Таким образом, в работе путем компьютерного моделирования была продемонстрирована возможность аннигиляции двух однотипных параллельных границ зерен при их сближении, теоретически предсказанная в [2]. Показано, что результатом аннигиляции является перестройка атомной структуры с объединением двух крайних зерен в одно целое и полным исчезновением центрального зерна, существовавшего между двумя границами. При этом на месте взаимодействия двух границ могут сформироваться локализованные дефекты структуры, результирующая удельная энергия которых составляет порядка 10% от исходной энергии двух плоских дефектов.

Полученные результаты важны для понимания природы процессов, протекающих при пластическом деформировании поликристаллов в условиях динамического нагружения.

Список литературы

- [1] *Дмитриев А.И., Никонов А.Ю., Псахье С.Г.* // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. В. 17. С. 16–22.
- [2] *Гуткин М.Ю., Микаелян К.Н., Овидько И.А.* // ФТТ. 2008. Т. 50. В. 7. С. 1216–1229.
- [3] *Дмитриев А.И., Никонов А.Ю., Псахье С.Г.* // Физ. мезомех. 2010. Т. 13. № 4. С. 15–24.
- [4] *Foiles S.M.* // MRS Bull. 1996. V. 21. N 2. P. 24–28.
- [5] *Болеста А.В., Головнев И.В., Фомин В.М.* // Физ. мезомех. 2000. Т. 3. № 5. С. 39–46.
- [6] *Plimpton S.J.* // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. N 1. P. 1–19.
- [7] *Дмитриев А.И., Псахье С.Г.* // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. В. 14. С. 8–12.
- [8] *Suzuki A., Mishin Y.* // Interface Sci. 2003. V. 11. N 1. P. 131–148.