

01;05

©1995 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ГЦК КРИСТАЛЛАХ ПРИ ИНТЕНСИВНЫХ ДЕФОРМАЦИЯХ

В.Е.Шудегов, А.И.Лобастов, В.А.Лизачев, В.А.Журавлев, В.Г.Чудинов

Удмуртский государственный университет,

426034, Ижевск, Россия

(Поступило в Редакцию 23 августа 1994 г.

В окончательной редакции 15 января 1995 г.)

Введение

Задача описания эволюции атомной структуры кристаллов при больших пластических деформациях является одной из важнейших в физике прочности и пластичности. В последнее время интерес к этой проблеме значительно возрос в связи с тем, что при интенсивных деформациях кристаллов удалось экспериментально обнаружить аморфную фазу [1-11]. Сейчас с появлением мощных общедоступных ЭВМ появилась возможность использования для решения подобных задач компьютерного моделирования, которое при корректном задании сил межатомного взаимодействия позволяет выявить закономерности структурообразования при больших пластических деформациях, фазовых переходах, аморфизации и т.д. Так, в работе [12] методом молекулярной динамики (ММД) исследовано поведение монокристаллов алюминия при больших (до $\sim 70\%$) пластических деформациях. Такой подход позволил непосредственно увидеть закономерности фрагментации монокристаллов, процессы зарождения дефектов и их эволюцию, ротационные механизмы пластичности, образование новых фаз типа σ -фазы и др. При всех переходах от одного механизма пластичности к другому наблюдалось явление сверхпластичности. В данной работе аналогичную задачу решали для ГЦК сплавов Fe + 50%Mn, взаимодействие атомов в которых описывали псевдопотенциалами.

Компьютерный эксперимент проводили как при циклических, так и при комбинированных (циклических по направлению $[001]$ ¹ и свободных вдоль $[100]$ и $[010]$) граничных условиях. В исходном (недеформированном) состоянии кристалл имел форму куба и ГЦК решетку. Общее количество атомов составляло 1372. Деформацию ϵ осуществляли поэтапно — на каждом этапе кристалл сжимали на 2% по направлению $[001]$. В случае циклических граничных условий одновременно с сжатием кристалл растягивался по направлениям $[100]$ и $[010]$ так, чтобы объем его в процессе деформации оставался постоянным. При комбинированных граничных условиях атомам предоставлялась возможность свободного перемещения вдоль $[100]$ и $[010]$.

Межатомное взаимодействие описывали псевдопотенциалами Fe–Fe в системе Fe + 50%Mn, рассчитанными нами по схеме Хейне–Абаренкого–Анималу с функцией экранировки Шоу [13]. Такие потенциалы, как показано в [14], позволяют описать максимальное число физических свойств (упругие модули, фоновые спектры, электропроводность и др.). Расхождение с экспериментом составляет $\sim 10\%$ для *s*- и *p*-металлов и $\sim 30\%$ для *d*-металлов. Особенность псевдопотенциала в нашем случае состояла в том, что он хорошо удерживал ГЦК решетку вплоть до 0 К. Компьютерный эксперимент проводили при 300 К. После каждого этапа деформирования систему релаксировали с использованием программы ММД [15,16] к новому равновесному состоянию.

В процессе проведения компьютерных экспериментов осуществляли непрерывный контроль за функцией радиального распределения атомов (ФРРА), температурой, энергией системы, расположением атомов в различных сечениях и другими параметрами.

Результаты и их обсуждение

Для анализа полученных результатов рассмотрим графики изменения потенциальной энергии при поэтапном деформировании кристалла (рис. 1,а,б). На рис. 1 представлена зависимость изменения потенциальной энергии системы (отнесенная к одному атому) от количества шагов релаксации системы (нижняя шкала абсцисс). Видно, что скачкам деформации отвечают ступеньки в энергетическом состоянии объекта, которые хорошо просматриваются на рис. 1,а при циклических граничных условиях. В случае комбинированных граничных условий наблюдаются лишь небольшие пики изменения потенциальной энергии (рис. 1,б). Отсутствие ступенек и более монотонный характер изменения функции в последнем случае объясняется предоставленной атомам возможностью свободного перемещения в направлениях $[100]$ и $[010]$. Верхняя шкала абсцисс дает представление о величине деформации сжатия.

При циклических граничных условиях, как видно из рис. 3, потенциальная энергия возрастает практически линейно вплоть до $\epsilon \approx 10\%$

¹ Здесь и ниже индексы направлений и плоскостей относятся к базису исходного недеформированного кристалла.

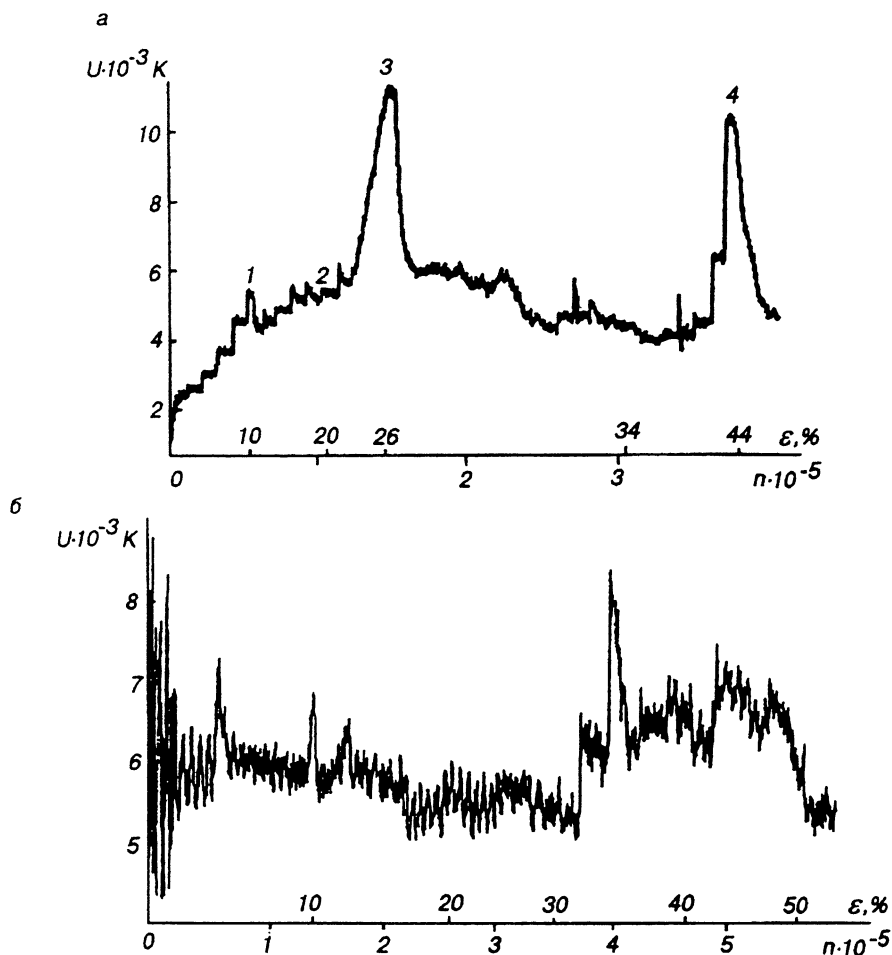


Рис. 1. Потенциальная энергия U в случае циклических (а) и комбинированных (б) граничных условий при поэтапном деформировании кристалла.

По оси абсцисс на верхней шкале отложена величина деформации ϵ , а на нижней — количество шагов n .

и не изменяется в процессе релаксации к новому состоянию. В случае комбинированных граничных условий на этом этапе наблюдаются сильные осцилляции потенциальной энергии. Однако в том и другом случаях, начиная с $\epsilon \approx 10\%$, после очередного шага по деформации и отвечающего ей скачка потенциальной энергии, как показывает анализ, происходят сдвиги плоскостей типа (111) относительно друг друга на величину $a/6$ (a — период решетки) за счет движения частичных дислокаций Шокли. Такие дислокации возникают при расщеплении единичных дислокаций по реакциям типа

$$a/2[01\bar{1}] = a/6[\bar{1}2\bar{1}] + a/6[11\bar{2}].$$

Движение образующихся частичных дислокаций Шокли приводит к сдвиговой деформации одной части кристалла относительно другой и

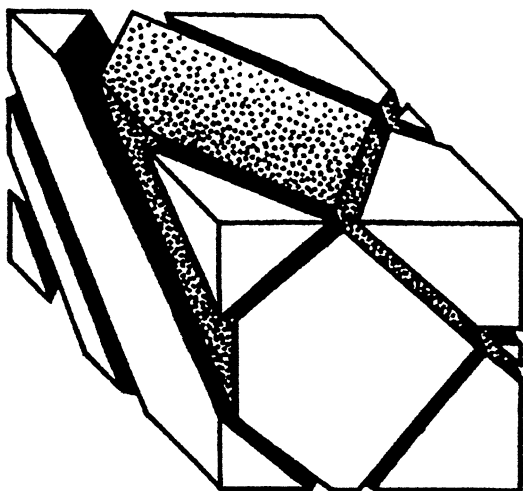


Рис. 2. Фрагментация монокристалла при деформации $\sim 10\%$ (при визуальном наблюдении необходимо учитывать циклические граничные условия по осям X, Y, Z).

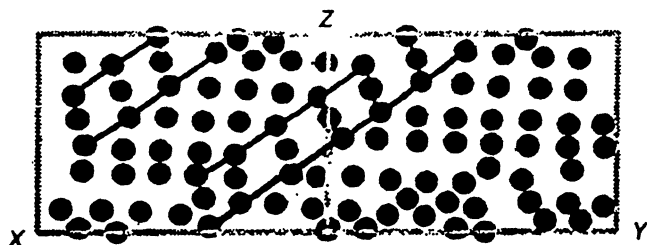


Рис. 3. Двойниковая структура, образовавшаяся после деформации $\sim 20\%$, у объекта с циклическими граничными условиями.

Показано расположение атомов в плоскости (110) в слое толщиной 1 \AA .

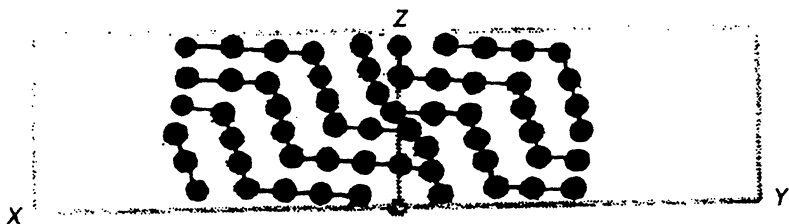


Рис. 4. Возникновение двойниковых структур в кристалле, деформированном на 14% .

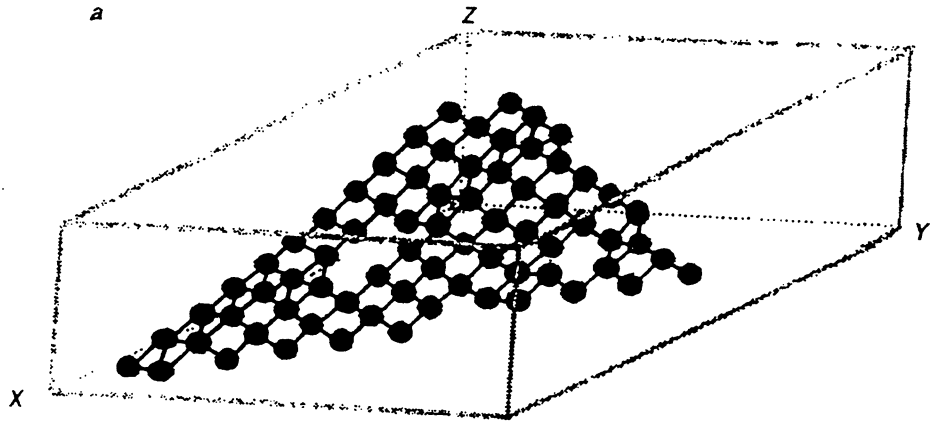
Комбинированные граничные условия.

к снятию возникающих в процессе деформации локальных напряжений. При этом в случае циклических граничных условий сдвиги происходят по двум взаимноперпендикулярным плоскостям типа (111), а при комбинированных граничных условиях — только по плоскостям ($\bar{1}\bar{1}1$). Этот процесс сопровождается образованием фрагментов, развернутых друг относительно друга на углы $\sim 3^\circ$. Для объекта с циклическими граничными условиями указанное обстоятельство хорошо видно из рис. 2, где показана фрагментация монокристалла при $\epsilon \approx 10\%$. Фрагменты отделены друг от друга границами, представляющими собой дефекты упаковки.

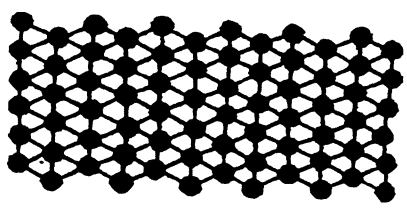
Отметим, что деформация кристалла, как и следовало ожидать, протекает легче при комбинированных граничных условиях, так как при этом создаются более благоприятные условия для перемещения атомов, а также для зарождения и роста двойников. Образование двойников, как показывают компьютерные фильмы, происходит следующим образом: при $\epsilon \approx 10\%$ начинаются сдвиги по плоскостям (111) за счет движения частичных дислокаций Шокли. Для кластера с комбинированными граничными условиями двойники образуются уже при $\epsilon \approx 14\%$ (рис. 3), а при циклических — лишь при $\epsilon \approx 20\%$. При этом на участке 1-2 (рис. 1,а) приращение от каждого этапа деформации практически полностью исчезает во время последующей релаксации системы к новому равновесному состоянию. Кроме того, размер фрагментов с увеличением степени деформации уменьшается, а развороты между ними увеличиваются. Установлено, что при встречном движении дислокаций в пересекающихся плоскостях скольжения образуются сидячие дислокации, которые являются эффективными барьерами для других дислокаций, скользящих в этих же плоскостях. В дальнейшем количество таких барьеров возрастает и, как показывает анализ компьютерных фильмов, на этих местах происходит скопление дислокаций. Указанное обстоятельство, как известно, является одной из основных причин деформационного упрочнения ГЦК кристаллов. При $\epsilon \approx 20\%$ в кристалле образуются первые двойниковые структуры (рис. 4). Здесь большинство дислокаций оказываются застопоренными, что свидетельствует о достижении предельных значений пластической деформации за счет трансляционных каналов пластичности. Поэтому дальнейшая пластическая деформация кристалла приводит к резкому увеличению потенциальной энергии. При $\epsilon \approx 26\%$ (на рис. 1,а этому участку соответствует мощный пик, обозначенный цифрой 3) в кристалле начинается рекристаллизационный процесс, в ходе которого решетка полностью перестраивается, а барьеры Люмер-Котрелла исчезают. В результате образуются более крупные фрагменты, вытянутые в направлении [111]. После завершения перестройки решетки энергия в системе вновь понижается до уровня, соответствующего $\epsilon \approx 24\%$, причем в процессе дальнейшей пластической деформации потенциальная энергия кристалла продолжала убывать за счет разворота образовавшихся фрагментов.

Качественно подобную картину наблюдали в случае деформации при комбинированных граничных условиях. С увеличением степени деформации двойники продолжали расти и при $\epsilon \approx 28\%$ они заняли весь объем кристалла. В результате образовалась решетка, которая имела двойниковую ориентацию по отношению к оси деформации ([001]) и, как видно из рис. 5, в ходе такого процесса произошли трансфор-

а



б



в

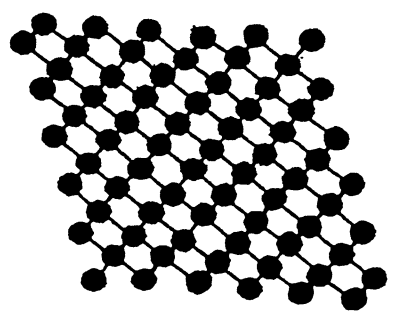


Рис. 5. Схема расположения атомов в сечениях толщиной 1 Å в плоскостях (111) (а), (010) (б) и (001) (в). Деформация ~ 28%. Комбинированные граничные условия.

мазия, разворот и деформация плоскостей: плоскость (111) исходной решетки перешла в плоскость типа (100) для продукта деформации, плоскость (010) перешла в плоскость (111), а плоскость (110) развернулась на 90° по отношению к первоначальному положению. Верхний край плоскости (001) сместился относительно нижнего на величину, пропорциональную числу пробежавших дислокаций.

Дальнейший анализ пространственного расположения атомов показал, что в случае циклических граничных условий при $\epsilon \approx 34\%$ фрагменты развернулись и вытянулись в плоскости (001) аналогично тому, как это имеет место при текстурообразовании. При $\epsilon \approx 44\%$ на графике изменения потенциальной энергии наблюдали второй пик (на рис. 1, а этот пик обозначен цифрой 4). Причина его появления, как и в предыдущем случае, обусловлена достижением предельных значений пластической деформации за счет трансляционных каналов пластичности. Последнее обстоятельство обусловлено застопориванием дислокаций из-за образовавшихся барьеров, а также отсутствием мест выхода дислокаций вследствие недостаточности пространства для соответствующей перестройки атомов в поперечных направлениях кристалла.

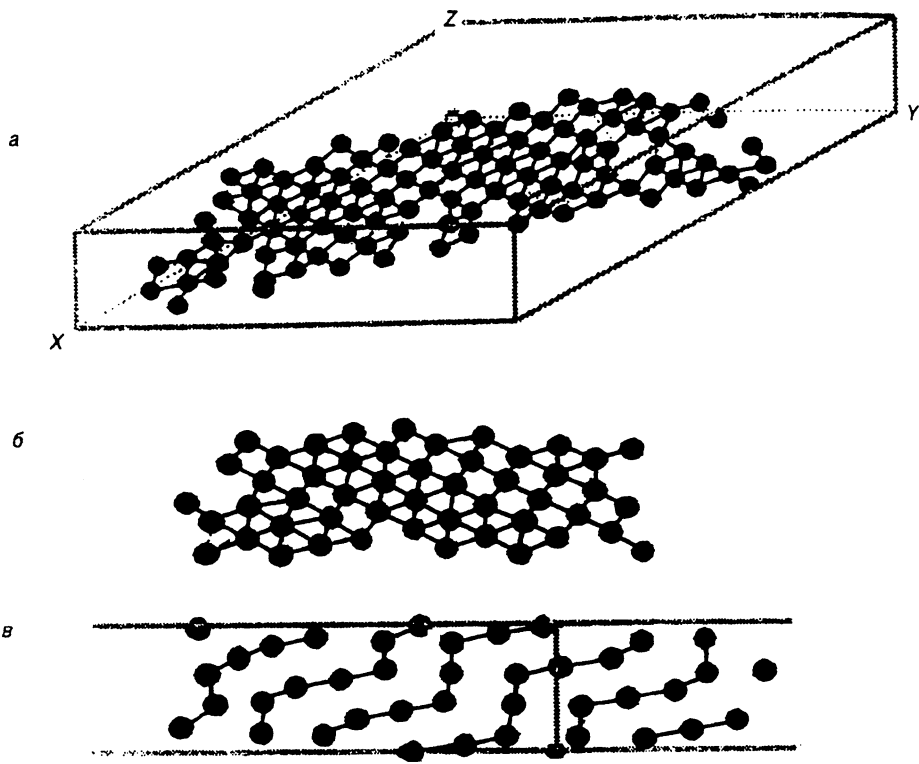


Рис. 6. Схема расположения атомов в сечениях толщиной 1 \AA в плоскостях (111) (а), (010) (б) и (110) (в). Деформация $\epsilon \sim 50\%$. Комбинированные граничные условия.

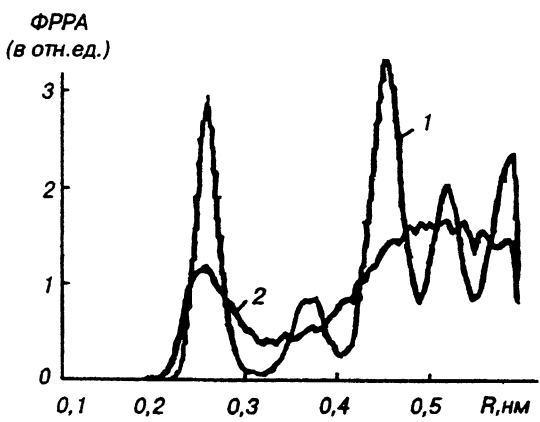


Рис. 7. ФРРА после освобождения границ. 1 — $\epsilon \sim 34$, 2 — $\sim 26\%$.

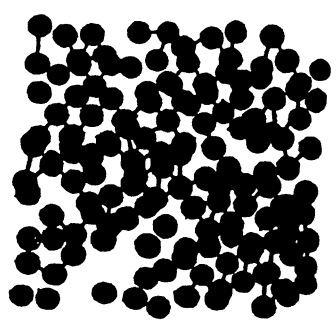


Рис. 8. Схема расположения атомов в слое (001) толщиной 1 \AA после аморфизации решетки.

У объекта с комбинированными граничными условиями деформацию проводили до $\epsilon \approx 56\%$. На рис. 6 представлены плоскости толщиной 1 \AA при $\epsilon \approx 50\%$. Отчетливо видно, что плоскости испытывают обратную трансформацию за счет двойникования. При $\epsilon \approx 56\%$ плоскости (110) развернулись примерно на 180° и приняли первоначальное положение. Первоначальное положение приняли также плоскости (111) и (010). Следовательно, в данном эксперименте наблюдается деформационный цикл (или цикл деформации), при котором кристаллическая решетка принимает первоначальную ориентацию.

Последнее обстоятельство касается обнаруженной нами аморфизации кластера при смене граничных условий. В этом компьютерном эксперименте кристалл, деформированный до заданной степени сжатия (при циклических граничных условиях), переводили в состояние со свободными граничными условиями (по всей поверхности!). Установлено, что если границы освобождены до или после прохождения пика на рис. 1,а, то существенная перестройка структуры не имеет места. Однако, когда освобождение границ осуществляли в момент времени, соответствующий появлению лишней энергии на рис. 1,а, происходила полная аморфизация структуры. Рис. 7 иллюстрирует это обстоятельство по характеру изменения ФРРА. Рис. 8 показывает расположение атомов в аморфизированном кластере. Как показал анализ, обнаруженная здесь аморфизация обусловлена резкой закалкой вещества, поскольку переход к свободным граничным условиям сопровождается интенсивным разогревом кластера (до 2000° в случае $\epsilon \approx 26\%$).

Таким образом, анализ полученных результатов показывает, что компьютерные эксперименты действительно могут служить эффективным средством исследования процессов структурных превращений при интенсивных деформациях.

Список литературы

- [1] Schwarz R.B., Johnson W.L. // Phys. Rev. Lett. 1982. Vol. 51. P. 415–418.
- [2] Herd S., Tu K.N., Ahn K.Y. // Appl. Phys. Lett. 1983. Vol. 42. P. 597–599.
- [3] Rossum M., Nicolet M.A., Johnson W.L. // Phys. Rev. B. 1984. Vol. 29. P. 5498–5503.
- [4] Atzman M., Unruh K.M., Johnson W.L. // J. Appl. Phys. 1985. Vol. 58. P. 3865–3870.
- [5] Schroder H., Samwer K., Koster M. // Phys. Rev. Lett. 1985. Vol. 54. P. 197–200.
- [6] Newcomb S.B., Tu K.N. // Appl. Phys. Lett. 1986. Vol. 49. P. 1436–1438.
- [7] Павлов В.А. // Физ. мет. и металловед. 1985. Т. 59. № 4. С. 629–649.
- [8] Павлов В.А., Кетова В.П., Яковенкова Л.И. и др. // Физ. мет. и металловед. 1987. Т. 64. № 5. С. 940–944.
- [9] Павлов В.А. Физ. мет. и металловед. 1989. Т. 67. № 5. С. 924–944.
- [10] Татьяна Е.В., Курдюмов В.Г., Федоров В.Б. // Физ. мет. и металловед. 1986. Т. 62. № 1. С. 133–137.
- [11] Дураченко А.М., Жорин В.А., Малиночка Е.А. // Металлофизика. 1986. Т. 8. № 5. С. 105–106.
- [12] Шудегов В.Е., Журавлев В.А., Лизачев В.А. и др. // Физика и механика новых материалов. Ижевск, 1992. С. 4–13.
- [13] Чудинов В.Г., Долгушева Е.Б., Юрьев А.А. // Сверхпроводимость: физика, химия, техника. 1991. Т. 4. С. 2086–2092.
- [14] Дядин В.М., Чудинов В.Г., Гондырева Л.И., Бычков Д.А. Деп. в ВИНТИ. № 1537-В-91. М., 1991. 23 с.
- [15] Новиков И.И., Розин К.М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. М.: Металлургия, 1990. 336 с.
- [16] Панин В.Е., Лизачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985. 230 с.