

# Влияние пластической деформации на разрушение монокристалла алюминия при ударно-волновом нагружении

© П.А. Жиляев, А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин

Объединенный институт высоких температур РАН,  
Москва, Россия

Московский физико-технический институт (Государственный университет),  
Долгопрудный, Московская обл., Россия

E-mail: PeterZhilyaev@gmail.com

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 12 января 2010 г.)

С помощью метода молекулярной динамики на примере алюминия исследуются процессы пластической деформации и начала разрушения монокристаллических металлов при ударно-волновом нагружении. Исследованы механизмы пластической деформации при сжатии в ударной волне и при растяжении в волнах разрежения. Изучено влияние дефектной структуры, образованной в волне сжатия, на откольную прочность и механизм разрушения. Получена зависимость величины откольной прочности от скорости деформации.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 09-08-01116-а, 09-08-12161-офи\_м, программ РАН № 11, 12.

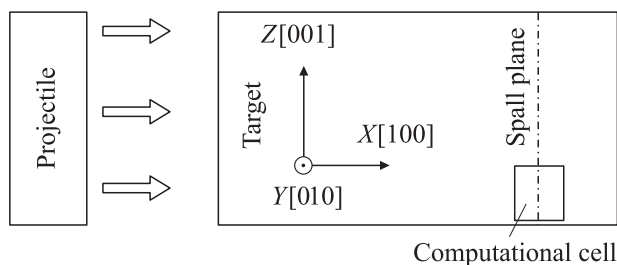
## 1. Введение

Молекулярная динамика (МД) является незаменимым инструментом в изучении процессов, протекающих при малых характерных временах ( $\sim 10^2$  ps). Множество подобных процессов сопровождается высокоскоростную деформацию твердых тел в результате ударно-волнового нагружения. Первые МД-расчеты, моделирующие прохождение ударной волны (УВ), были проведены более 25 лет назад [1,2]. Диапазон скоростей деформирования, доступных сейчас в рамках численного эксперимента ( $\sim 10^8 - 10^{12}$  s $^{-1}$ ), приближается к максимальным скоростям деформации в реальных ударно-волновых экспериментах ( $\sim 10^8$  s $^{-1}$ ). Таким образом, становится возможным непосредственное сравнение экспериментальных данных и результатов компьютерного моделирования.

На рис. 1 показана схема проведения УВ-эксперимента: столкновение налетающего ударника с покоящейся мишенью. Далее будем рассматривать для простоты случай, когда ударник и мишень состоят из одного и того же материала. При соударении образуются две волны сжатия; одна распространяется по веществу мишени, другая — по ударнику. Типичное соотношение толщин ударника и мишени в УВ-экспериментах — 1:2 или 1:3. Поэтому волна сжатия, движущаяся по ударнику, первой достигает свободной поверхности и отражается от нее в виде волны разрежения. В результате распространяющиеся друг за другом ударная волна и волна разрежения образуют импульс сжатия конечной ширины. При отражении ударной волны от свободной поверхности мишени формируется вторая волна разрежения, а суперпозиция двух волн разрежения приводит к появлению растягивающих напряжений, т. е. области отрицательного давления в материале мишени. При достижении давлением критической величины, называемой откольной прочностью материала, происходит локальное разрушение образца и откол [3].

Экспериментально установлено, что наибольшей динамической прочностью обладают монокристаллические образцы [3]. Однако уже у монокристаллов динамическая прочность существенно зависит от дефектов кристаллической структуры, в частности от наличия дислокаций. Они присутствуют практически в любых монокристаллах; более того, их плотность при пластической деформации в УВ может увеличиваться на порядки. В настоящей работе воспроизведены характерные дефекты кристаллической решетки (дислокации, двойники, вакансии и т.д.), возникающие в монокристаллах при УВ-нагружении, и исследовано их влияние на прочностные свойства материала.

Для этого были промоделированы условия, в которых пребывает объем монокристалла в результате прохождения УВ и волны разрежения. При этом рассматривается только часть образца, находящаяся вблизи линии откола (рис. 1). Предложенная модель позволяет увеличить характерные времена расчета, пространственные масштабы интересующей нас области образца (где происходит разрушение и откол) и существенно расширить диапазон скоростей деформирования по сравнению с моделью ударник-мишень (см., например, [4,5]). Проанализирована пластическая деформация при сжатии, растяжении,



**Рис. 1.** Схема УВ-эксперимента. Штрихпунктирной линией указана плоскость, в которой происходит откол. На этой плоскости выделяется „элемент“ вещества, эволюция которого рассматривается в дальнейших расчетах.

механизмы разрушения, получена зависимость откольной прочности от скорости деформирования. В настоящей работе сравниваются данные, полученные в модели с дефектной структурой, с результатами для идеальных монокристаллов, а также производится сравнение с экспериментальными значениями [6].

## 2. Модель и метод расчета

В методе МД вещество моделируется набором ограниченного числа частиц, уравнения движения которых интегрируются численно [7,8]. В нашем случае кристалл алюминия моделировался атомами, помещенными в объем (расчетную ячейку) в форме параллелепипеда. Изначально атомы располагались в узлах гранцентрированной решетки, и их взаимодействие описывалось с помощью потенциала погруженного атома (см., например, [9]). В настоящей работе для сравнения использовались две различные параметризации потенциала погруженного атома [10,11]. Они различаются набором физических характеристик алюминия, по которым происходит подгонка потенциалов. На расчетную ячейку накладываются трехмерные периодические граничные условия. Растяжение и сжатие моделируются масштабированием координат всех атомов и расчетной ячейки на каждом шаге численного интегрирования. Все расчеты были проведены при  $T = 100$  К. Данная температура была выбрана для того, чтобы тепловые колебания атомов не препятствовали наблюдению дефектной структуры. Размер системы варьировался от 200 тыс. до 3 млн. атомов. Времена расчета лежали в диапазоне  $10^2 - 10^4$  ps в зависимости от скорости деформирования. Все расчеты были проведены с помощью пакета программ LAMMPS [12].

Компьютерный эксперимент был разделен на три этапа. Первый этап — одноосное сжатие расчетной ячейки с постоянной скоростью (см., например, [13]) — моделирует процесс прохождения импульса сжатия. Условия одноосной деформации реализуются в быстропротекающих процессах, когда релаксация в поперечных направлениях не успевает происходить, так как в образце еще нет достаточного количества дефектов, которые могли бы обеспечивать пластическую деформацию и релаксацию напряжений (как раз на этом этапе происходит их активное зарождение и размножение).

Второй этап соответствует релаксации, которая при УВ-нагрузении происходит в результате суперпозиции падающей волны сжатия и отраженной волны разрежения. В модели система проводится к нулевым напряжениям вдоль всех трех осей. При этом температура системы в конце этого этапа была равна 100 К.

Третий этап — всестороннее растяжение — моделирует эволюцию твердой фазы в области отрицательного давления при суперпозиции волн разрежения. На этом этапе реализуется случай всестороннего растяжения, так как в структуре материала уже есть дефекты, обеспечивающие пластическую деформацию, снимающую девиаторные напряжения [14].

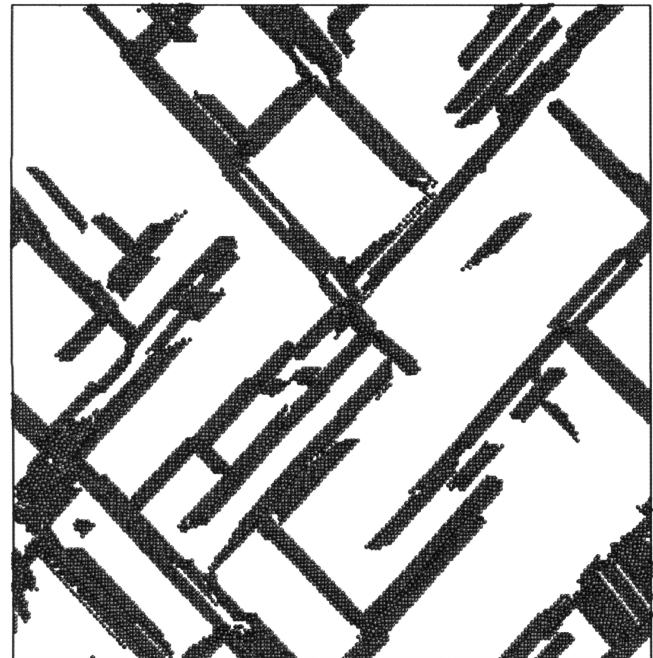
Анализ атомной структуры в расчетной ячейке структуры проводился с помощью параметра центральной симметрии  $P$ , характеризующего степень симметрии локального окружения каждого атома [15]. Этот параметр задается следующей формулой:

$$p = \sum_{i=1}^6 |\mathbf{R}_i + \mathbf{R}_{i+6}|^2, \quad (1)$$

где  $\mathbf{R}_i$  — радиус-вектор  $i$ -го атома. Он позволил выделять плоскости сдвига и дислокации.

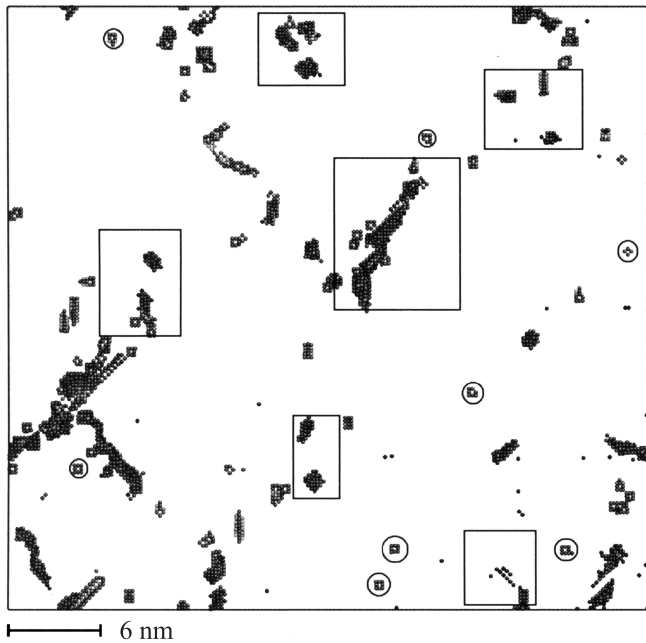
## 3. Результаты

На первом этапе компьютерного эксперимента путем одноосного сжатия расчетной ячейки были смоделированы термомеханические условия, в которых находится вещество при прохождении по нему импульса сжатия. При малой степени деформации имеет место упругое сжатие, затем происходит пластическая деформация, появляются частичные дислокационные петли. На рис. 2 показан срез структуры в направлении  $[010]$ , выделены только дефекты упаковки. Возникшая структура представляет собой множество пересекающихся плоских дефектов упаковки, окруженных петлями частичных дислокаций.



— 6 nm

**Рис. 2.** Срез структуры в направлении  $[010]$ . Толщина среза четыре атомарных слоя. Выделены (на основе параметра центральной симметрии) только дефекты упаковки. Возникшая структура представляет собой множество пересекающихся плоских дефектов упаковки, окруженных петлями частичных дислокаций. Потенциал [10]. Количество атомов в системе  $N = 2 \cdot 10^6$ . Размер расчетной ячейки  $100 \times 90 \times 80$  периодов решетки.



**Рис. 3.** Остаточные дефекты. Окружностями выделены вакансии, прямоугольниками — дислокационные петли. Показаны только атомы, составляющие дефекты кристалла (выделены на основе параметра центральной симметрии). Потенциал [10]. Количество атомов в системе  $N = 2 \cdot 10^6$ . Размер расчетной ячейки  $100 \times 90 \times 80$  периодов решетки.

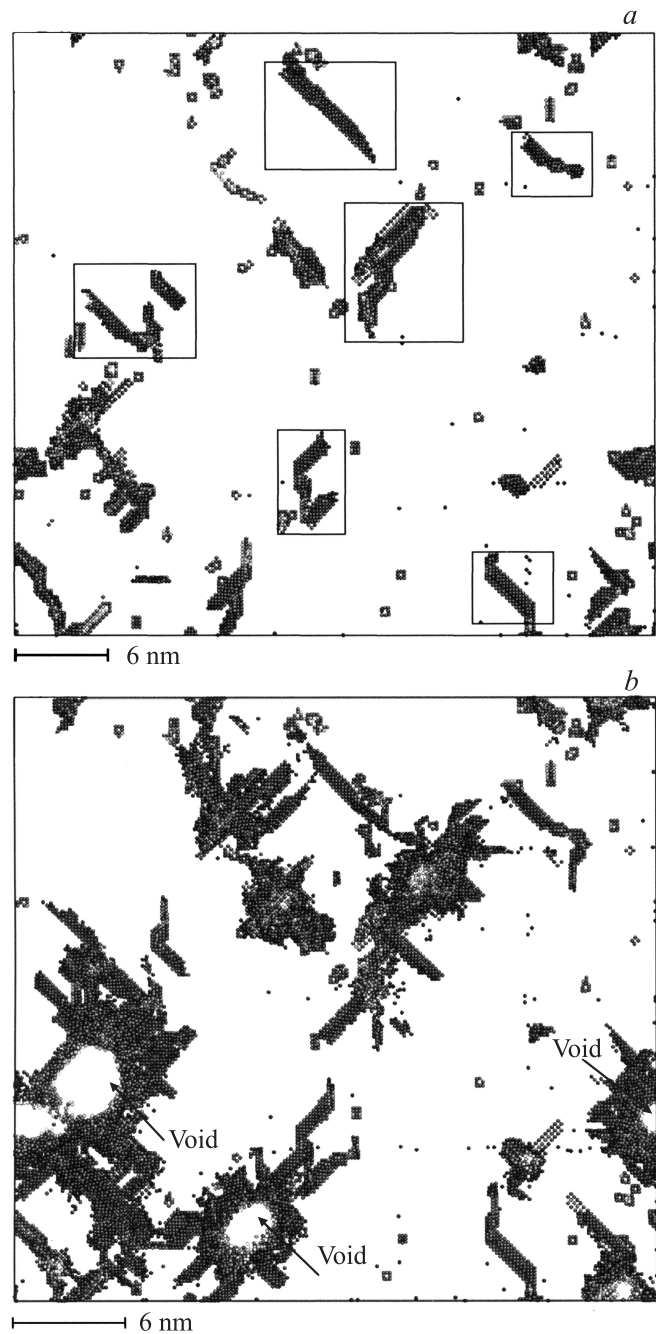
Вектор Бюргера дислокации был определен на основании анализа структуры. Подобные дислокационные петли наблюдались как при одноосном сжатии в других работах [16], так и при прямом МД-моделировании УВ в модели ударник-мишень [4,5]. Эволюция структуры дислокационной подсистемы при ударно-волновом сжатии также изучается методом дискретной дислокационной динамики [17], который позволяет рассматривать большие времена, чем в МД. Но при таком рассмотрении исчезает атомистическое описание процессов.

Вторым этапом расчета является релаксация напряженного состояния, которая имеет место после прохождения импульса сжатия. После нее в образце остается существенно меньшее число дефектов по сравнению с их количеством в конце процесса одноосного сжатия на первом этапе. Они представляют собой вакансии и небольшие по размерам плоскости сдвига дислокационные петли (рис. 3). Такие же остаточные дефекты наблюдаются и в МД-расчетах, где используется модель ударник-мишень [4,5].

В процессе всестороннего растяжения размер дислокационных петель увеличивается, и через некоторое время они начинают пересекаться друг с другом. Величина девиаторных напряжений в расчетной ячейке на этом этапе для расчетов с обеими модификациями потенциала не превышала 10 МПа, что недостаточно для движения дислокаций. Таким образом, движение дисло-

каций обеспечивалось не макроскопическим сдвиговым напряжением, а его локальной концентрацией.

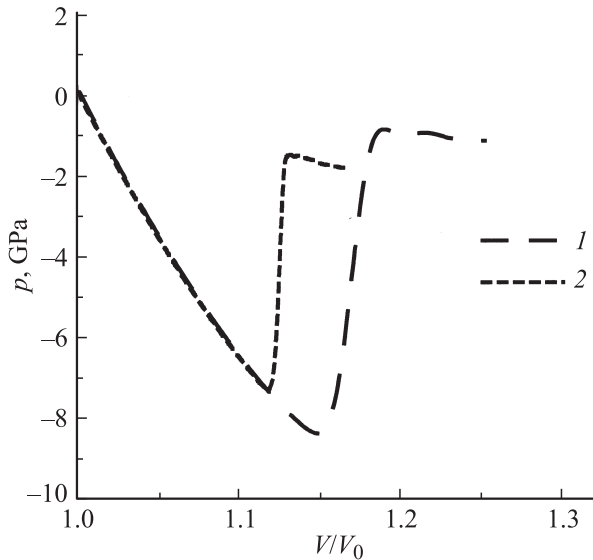
При достижении критического напряжения в процессе растяжения около плоскостей сдвига и в местах их пересечений образуются полости, и начинается их рост. На срезе системы видно, что часть полостей



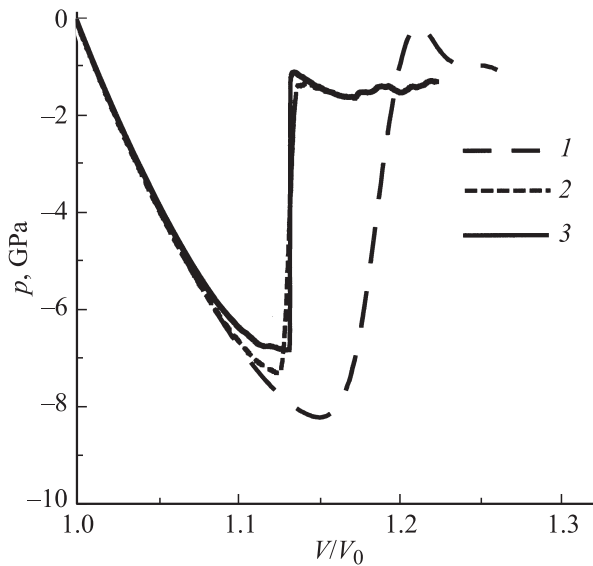
**Рис. 4.** Рост дислокационных петель (при растяжении) и зарождении плоскостей. Время после начала растяжения, ps:  $a - 440$ ,  $b - 480$ ,  $c - 520$ . Показаны только атомы, составляющие дефекты кристалла (выделены на основе параметра центральной симметрии). Потенциал [10]. Стрелками показаны образовавшиеся в результате растяжения полости. Количество атомов в системе  $N = 2 \cdot 10^6$ . Размер расчетной ячейки  $100 \times 90 \times 80$  периодов решетки.

имеет форму, близкую к октаэдрической (рис. 4). Это обстоятельство свидетельствует о том, что при росте полостей большую роль играет механизм роста пор за счет локальных сдвигов с образованием дислокационных петель [18,19].

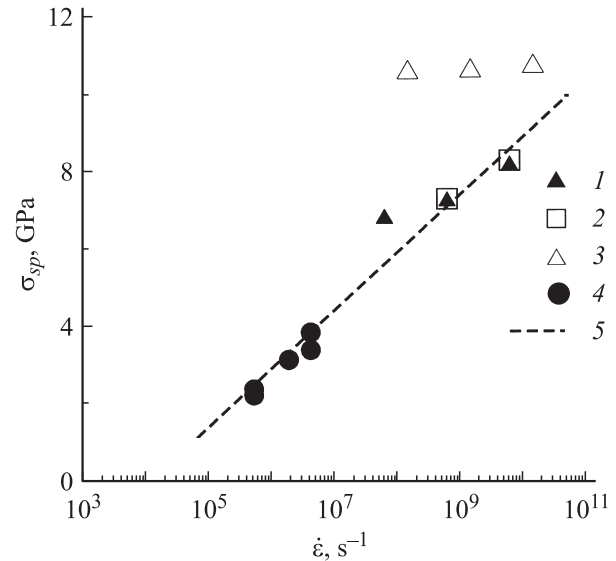
На рис. 5 и 6 представлены диаграммы растяжения для двух параметризаций потенциала погруженного атома [10,11]. Результаты для этих двух параметризаций оказались очень близкими по величине откольной прочности.



**Рис. 5.** Диаграмма всестороннего растяжения системы с дефектами при постоянной температуре 100 К для потенциала [10]. Скорость деформирования  $\dot{\epsilon} = 6 \cdot 10^9$  (1) и  $6 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$  (2).



**Рис. 6.** Диаграмма всестороннего растяжения системы с дефектами при постоянной температуре 100 К для потенциала [11]. Скорость деформирования  $\dot{\epsilon} = 6 \cdot 10^9$  (1),  $6 \cdot 10^8$  (2) и  $6 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$  (3).



**Рис. 7.** Зависимость откольной прочности от скорости деформирования. МД-моделирование всестороннего растяжения при постоянной температуре 100 К: 1, 2 — модель с дефектами, образующимися при УВ-сжатии, потенциалы [10] и [11] соответственно, 3 — монокристалл без дефектов, потенциал [10], 4 — экспериментальные данные для монокристаллов алюминия [6], 5 — аппроксимация соотношением (4) при  $V_0 = 1 \text{ \AA}$ .

Данные о зависимости откольной прочности от скорости растяжения представлены на рис. 7. На нем также приведены результаты расчета прочности при всестороннем растяжении и постоянной температуре 100 К монокристалла без дефектов, был использован потенциал [10] (размер системы 1 млн. атомов).

Для монокристалла с дефектами наблюдается заметное снижение откольной прочности по сравнению с бездефектным монокристаллом. Такое снижение обусловливается тем, что вероятность возникновения полостей на дефектах кристаллической структуры значительно больше, чем в идеальном кристалле [18]. Внесение дефектов приводит к значительному уменьшению размеров критического зародыша и соответственно к выигрышу в энергии при его образовании. Аналогичное снижение откольной прочности наблюдается и для поликристаллических образцов [20].

Несмотря на то что термofлуктуационное описание кинетики зарождения повреждений твердых тел [21] принято считать применимым лишь для малых скоростей деформации ( $\sim 10^{-7} - 10^3 \text{ s}^{-1}$ ), можно попытаться применить его для интерпретации зависимости откольной прочности от скорости деформирования в рассматриваемых режимах деформации. Согласно формуле Журкова [18],

$$J = J_0 \exp\left(\frac{\sigma_{sp} V_0 - E_0}{kT}\right), \quad (2)$$

где  $J$  — частота зарождения полостей,  $J_0$  — размерный фактор,  $k$  — константа Больцмана,  $T$  — температура,  $E_0$  — энергия активации зарождения микрополости в

твердом теле при нулевом напряжении,  $\sigma_{sp}$  — откольная прочность,  $V_0$  — параметр, пропорциональный критическому объему микрополости. Будем считать, что момент откола определяется равенством скорости зарождения полостей и скорости деформирования

$$J = A\dot{\epsilon}, \quad (3)$$

где  $A$  — некоторая константа. В отличие от модели „нуклеация и рост“ (см., например, [22]) в этом простом соотношении не учитывается рост существующих полостей — предполагается, что вклад в деформацию дает только зарождение новых полостей. Преобразуя (2) и (3), получаем

$$\sigma_{sp} = \frac{1}{V_0} \left( E_0 + kT \ln \frac{A\dot{\epsilon}}{J_0} \right). \quad (4)$$

Согласно соотношению (4), при уменьшении размера критического зародыша в дефектной структуре увеличивается наклон зависимости откольной прочности от скорости деформирования. Оценка по приведенным на рис. 7 данным экспериментов (точки 4 и 5) и расчетов (точки 2 и 3) дает  $V_0 \sim 1-2 \text{ \AA}$ . По анализу атомной структуры в расчетной МД-ячейке не удалось определить размер критического зародыша полости ввиду его малости. Поэтому можно сделать предположение, что характерный размер полости порядка среднего расстояния между атомами. Это согласуется со сделанной оценкой, если принять, что  $V_0$  имеет смысл размера критической полости. Экспериментальные данные по откольной прочности для монокристаллов алюминия [6] и результаты МД-расчетов, полученные в настоящей работе для пластически деформированного монокристалла алюминия, согласуются как по абсолютной величине, так и по наклону зависимости откольной прочности от скорости деформации.

#### 4. Заключение

В настоящей работе на основе метода молекулярной динамики проведено исследование процессов пластической деформации и разрушения монокристаллического алюминия. Результаты моделирования показывают, что в монокристалле алюминия в рассмотренном диапазоне скоростей деформирования пластическая деформация обусловлена появлением и ростом частичных дислокационных петель, а разрушение — зарождением полостей на дислокационных петлях. Наличие дефектной структуры, возникающей при ударно-волновом нагружении, приводит к значительному падению откольной прочности и ее более резкой зависимости от скорости деформирования по сравнению с исходной монокристаллической структурой. Результаты расчетов откольной прочности пластически деформированного монокристалла алюминия находятся в согласии с экспериментальными данными.

Расчеты проведены на вычислительном кластере СИ ТЭС ОИВТ РАН и вычислительном кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ (ГУ).

#### Список литературы

- [1] В.Ю. Клименко, А.Н. Дремин. ДАН СССР **251**, 1379 (1980).
- [2] B.L. Holian, W.G. Hoover, B. Moran, G.K. Straub. Phys. Rev. A **22**, 249 (1980).
- [3] T. Antoun, L. Seaman, D.R. Curran, G.I. Kanel, S.V. Razorenov, A.V. Utkin. Spall fracture. Springer, N.Y. (2003). 405 p.
- [4] B. Cao, E.M. Bringa, M.A. Meyers. Met. Mater. Trans. A **38A**, 2683 (2007).
- [5] В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ЖЭТФ **131**, 1064 (2007).
- [6] G.I. Kanel, S.V. Razorenov, K. Baumung, J. Singer. J. Appl. Phys. **90**, 136 (2001).
- [7] M.P. Allen, D.J. Tildesley. Computer simulation of liquids. Clarendon Press, Oxford (1989). 385 p.
- [8] А.А. Валуев, Г.Э. Норман, В.Ю. Подлипчук. В сб.: Математическое моделирование. Физико-химические свойства веществ. Наука, М. (1989). С. 5.
- [9] Д.Л. Белашенко. Компьютерное моделирование жидких и аморных веществ. МИСИС, М. (2005). 408 с.
- [10] Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, J.D. Kress. Phys. Rev. B **63**, 224 106 (2001).
- [11] X.-Y. Liu, F. Ercolessi, J.B. Adams. Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **12**, 665 (2004).
- [12] S.J. Plimpton. J. Comp. Phys. **117**, 1 (1995).
- [13] M.A. Moilevsky, I.O. Mynkin. Combust. Explos. Shock Waves **24**, 6 (1988).
- [14] E.M. Bringa, H.M. Zbib, J.M. McNaney, B.A. Remington. Appl. Phys. Lett. **89**, 171 918 (2006).
- [15] C. Kelchner, S. Plimpton, J. Hamilton. Phys. Rev. B **58**, 11 085 (1998).
- [16] A.M. Meyers. Dynamics behavior of materials. Wiley-Interscience, N.Y. (1994). 668 p.
- [17] H.M. Zbib, T.D. Díaz de la Rubia, M. Rhee, J.P. Hirth. J. Nucl. Mater. **276**, 154 (2000).
- [18] J. Belak. J. Comp. Aided Mater. Design **5**, 193 (1998).
- [19] А.Ю. Куксин, Г.Е. Норман, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. Shock Compression Cond. Matter. AIP Conf. Proc. **955**, 317 (2007).
- [20] А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ФТТ **50**, 1984 (2008).
- [21] С.Н. Журков, В.С. Куксенко, В.А. Петров. ДАН СССР **259**, 1350 (1981).
- [22] А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин. ДАН **413**, 615 (2007).