

01;05

Об аномально высокой скорости перемещения границ зерен при высокоскоростном сдвиговом нагружении

© С.Г. Псахье, К.П. Зольников

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Поступило в Редакцию 19 марта 1997 г.

Проведено компьютерное моделирование поведения межзеренной границы в образце алюминия в условиях высокоскоростного сдвигового нагружения. Расчеты проводились на основе метода молекулярной динамики и теории псевдопотенциала. Было обнаружено, что в условиях данного типа нагружения граница зерен может перемещаться с аномально высокой скоростью, превосходящей даже скорость приложенного сдвига. Исследуются атомные механизмы, обуславливающие данный эффект.

Исследование отклика материала в условиях высокоэнергетического воздействия представляет значительный интерес как с научной точки зрения, так и с точки зрения практического материаловедения. Аномально высокие скорости массопереноса, течение материалов без сопротивления и т. д. могут реализоваться в материалах при больших сдвиговых деформациях [1–7]. Моделирование высокоскоростного сдвига привело к обнаружению ряда важных особенностей [8–10]. Так, в материалах, содержащих границы зерен специального типа, сдвиговое нагружение приводит к вихреобразному коллективному движению атомов в области межзеренной границы. При этом наибольшие смещения зернограничных атомов наблюдаются в направлении, перпендикулярном направлению сдвига. В работе [11] отмечалось, что высокоскоростное механическое нагружение материала ведет к образованию и распространению в нем солитонообразных импульсов. Наиболее отчетливо эти импульсы видны при низких температурах, а их взаимодействие со структурными дефектами может вызвать генерацию так называемых hot spots [12,13], локальных участков с повышенной по сравнению с усредненной по образцу температурой.

В настоящей работе проводилось изучение влияния высокоскоростного нагружения на изменение микроструктуры границ зерен. При этом моделировалась отдельно взятая хорошо аттестованная граница зерен и изучались ее структурные перестройки и атомные механизмы, обуславливающие особенности отклика.

Так же как и в работах [8–12], моделирование проводилось с помощью уникального программного комплекса MONSTER-MD, в основу которого положен метод молекулярной динамики. Объектом моделирования являлся трехмерный кристаллит алюминия, содержащий границу зерен специального типа $\Sigma 7$, с осями координат, ориентированными вдоль следующих кристаллографических направлений: ось OX — $[111]$, ось OY — $[2\bar{1}\bar{1}]$, ось OZ — $[01\bar{1}]$.

В настоящей работе использовалась атомная система единиц, которая является принятой для проведения расчетов на микроуровне [14]. Размеры образца составляли вдоль направлений OX — 167 ат. ед., OY — 65 ат. ед., OZ — 40 ат. ед. Граница зерен находилась посередине образца перпендикулярно оси OX . Образец содержал около 4000 атомов. Вдоль направлений OY и OZ использовались периодические граничные условия, а по краям образца в направлении оси OX прикладывалось сдвиговое нагружение со скоростью

$$V_x = V_z = 0;$$

$$V_y^l = -V_y^r = -2.5 \cdot 10^{-5} \text{ а. е. } (\approx 50 \text{ м/с}),$$

где V_y^l и V_y^r — составляющая скорости на левом и правом краю образца соответственно.

Взаимодействие между атомами описывалось в парном приближении в рамках теории псевдопотенциала, так же как в [15]. Перед моделированием механического нагружения кристаллит был тщательно отрелаксирован.

Расчеты показали, что под воздействием такого рода нагружения в межзеренной области возникает вихреобразное движение атомов [8–10] и граница начинает смещаться вдоль оси OX . Положение границы зерен и структура одного из атомных слоев, перпендикулярных оси OZ , показаны на рис. 1. Аналогичное поведение атомной структуры наблюдается и для всех других атомных плоскостей моделируемого кристаллита. Отметим, что граница зерен, смещаясь вдоль образца, замедляет свою скорость и останавливается вблизи ”захвата” образца. Проведенные

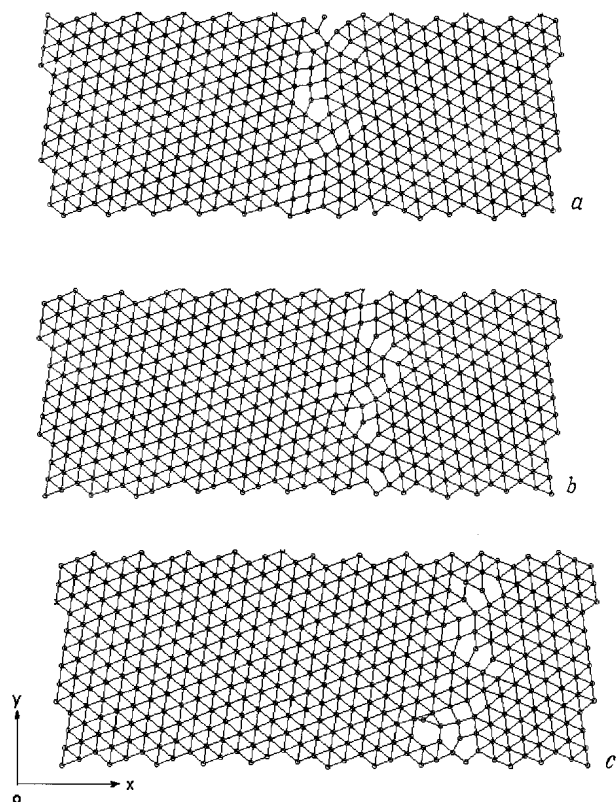


Рис. 1. Положение межзеренной границы для одной из атомных плоскостей в различные моменты времени: $a - t = 0$; $b - t = 120\,000$ ат.ед.; $c - t = 250\,000$ ат.ед.

тестовые расчеты показали, что при смене направления сдвигового нагружения на противоположное граница движется в противоположном направлении. Отметим, что при таком воздействии все атомные смещения в области межзеренной границы являются взаимосогласованными. Проведенные оценки скорости перемещения границы зерен показали, что она перемещается с аномально высокой скоростью (до 600 м/с), т. е. со скоростью большей, чем скорость сдвигового нагружения.

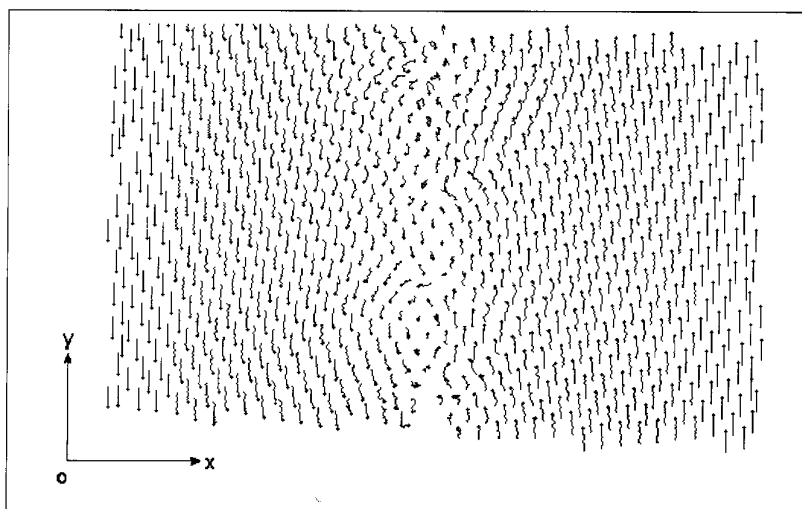


Рис. 2. Траектории движения атомов для трех атомных плоскостей за период времени $0 < t < 80\,000$ ат. ед.

Анализ атомных траекторий, полей скоростей, структуры кристаллита в различные временные отрезки указывает на ярко выраженный нелинейный характер процессов, происходящих в образце при таком воздействии (рис. 2).

Анализ показал, что рост одного зерна в результате смещения границы зерен осуществляется на основе групповых, кооперативных смещений атомов. Это соответствует коррелированному нелинейному движению групп атомов, причем смещение каждого отдельно взятого атома является достаточно малым, что хорошо видно из рис. 1.

Таким образом, в настоящей работе на основе компьютерного моделирования впервые обнаружено перемещение границы зерен с anomalно высокими скоростями в условиях высокоскоростного сдвигового нагружения. Отметим, что подобные условия могут реализовываться в материалах не только в экстремальных условиях эксплуатации, но и при обычных, как следствие гетерогенности материала в зонах концентраторов напряжений, а также при раскрытии трещин и образовании различного рода несплошностей, когда в образце могут

возникать локальные высокоскоростные сдвиговые деформации. Данное поведение границ зерен может оказывать существенное влияние на изменение микроструктуры материала и, как результат, на его свойства и особенности поведения.

Список литературы

- [1] Ениколопан Н.С. // ДАН СССР. 1985. Т. 251. С. 283–286.
- [2] Ениколопан Н.С. // ЖФХ. 1989. Т. 63. № 9. С. 1261–1265.
- [3] Болдырев В.В. // Изв. АН СССР. Сер. хим. 1990. В. 10. С. 2238–2245.
- [4] Псахье С.Г., Коростелев С.Ю. // Структурные уровни пластической деформации и разрушения / В.Е. Панин, Ю.В. Гриняев, В.И. Данилов и др. Новосибирск: Наука, 1990. С. 204–231.
- [5] Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Хон Ю.А., Елсукова Т.Ф. // Изв. вузов. Физика. 1982. № 12. С. 5–28.
- [6] Панин В.Е., Мещеряков Ю.И., Елсукова Т.Ф., Диваков А.К., Псахье С.Г., Мышляев М.М. // Изв. вузов. Физика. 1990. № 2. С. 107–120.
- [7] Панин В.Е. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Новосибирск: Наука, 1995. С. 7–49.
- [8] Псахье С.Г., Коростелев С.Ю., Негрескул С.И., Зольников К.П., Ванг Ж., Ли Ш. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. В. 1. С. 36–39.
- [9] Psakhie S.G., Korostelev S.Yu., Negreskul S.I., Zolnikov K.P., Wang Z., Li S. // Phys. Stat. Sol. (B). 1993. V. 176. k41–k44.
- [10] Zolnikov K.P., Psakhie S.G., Negreskul S.I., Korostelev S.Yu. // J. of Materials Science and Technology. 1996. V. 12. N 3. P. 235–237.
- [11] Псахье С.Г., Зольников К.П., Коростелев С.Ю. // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 13. С. 1–5.
- [12] Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю. // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 10. С. 6–9.
- [13] Tsai D.H. // J. Chem. Phys. 1991. V. 95. N 10. P. 7497–7503.
- [14] Harrison W.A. // Pseudopotential in the Theory of Metals. New York/Amsterdam, 1966.
- [15] Псахье С.Г., Панин В.Е. // ФММ. 1980. Т. 50. С. 620–624.