

А.В. Калинин, Д.Д. Рудер

Компьютерное моделирование деформации простого сдвига ГЦК кристалла по системе скольжения $(111) \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$

Механические свойства материалов определяют его отклик на внешние механические воздействия. Исследование механических свойств кристаллов включает построение уравнений состояния и определение предельных значений параметров деформации и механического напряжения кристаллов. При достижении предельного состояния происходит либо разрушение кристалла, либо в кристалле происходят внутренние смещения атомов, вызывающие искажение первоначальной симметрии кристаллической решетки и/или возникновение дефектов кристаллической решетки. Зарождение, размножение и движение этих дефектов определяют начало и развитие пластической стадии деформации кристалла. Таким образом, достижение предельного состояния характеризует конец упругой стадии деформации и начало пластической стадии деформации. Основным методом исследования деформации кристаллов в упругой области явился термодинамический метод однородной деформации кристалла, предложенный Борном [1]. К сожалению, этот метод не позволяет описать характер внутренних смещений атомов, происходящих в кристалле при приложении механических напряжений, превышающих предельные значения. В последние годы решение подобных задач стало возможным на основе методов компьютерного моделирования [2].

Определение критических значений параметров деформации и напряжений, а также исследование характера внутренних смещений атомов в кристалле представляют значительный научный интерес, так как важны для изучения и понимания механизмов пластической деформации кристаллов.

Известно, что наиболее распространенной системой скольжения в ГЦК кристаллах является система $(111) \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$, при которой происходит сдвиг плотноупакованных плоскостей (111): ГЦК решетки в направлении [3].

Целью данной работы было моделирование квазистатической деформации простого сдвига по системе скольжения $(111) \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ в ГЦК кристалле, расчет кривой деформации и исследование характера внутренних смещений атомов на пластической стадии деформации.

В качестве конкретного метода моделирования использовался метод молекулярной динамики. Для описания взаимодействия между атомами используется потенциал парного взаимодействия Леннарда-Джонса:

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

с параметрами $\epsilon/k = 119.8 \text{ К}$, $\sigma = 3.405 \text{ \AA}$.

В исходном состоянии МД-ячейка представляет собой прямоугольный параллелепипед, стороны которого параллельны декартовым осям координат – X, Y, Z. Атомы располагаются в узлах ГЦК решетки, узловы плоскости которой параллельны плоскости $X = 0$, кристаллографическое направление $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ параллельно оси kY, а направление $\langle 11\bar{2} \rangle$ – оси kZ. Размеры МД-ячейки вдоль осей координат равны соответственно $S_x = (1/\sqrt{3}) \cdot n_x \cdot a$, $S_y = (1/\sqrt{2}) \cdot n_y \cdot a$, $S_z = \sqrt{3/2} \cdot n_z \cdot a$, где n_x – число узловых плоскостей (111), n_y – число узловых плоскостей $(\bar{1}\bar{1}0)$, n_z – число узловых плоскостей $(11\bar{2})$. Параметр ГЦК решетки аргона равен $a = 1.5452\sigma$.

Начальные скорости атомов задавались случайным образом, так что распределение атомов по скоростям соответствовало функции распределения Больцмана для заданной температуры.

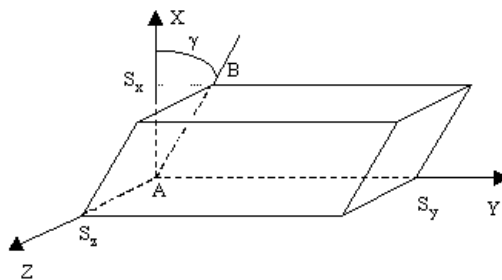


Рис. 1. Схема простого сдвига МД-ячейки

Для моделирования деформации простого сдвига в системе производилось сдвиговое деформирование МД-ячейки, при котором прямоугольный параллелепипед превращался в косоугольный (см. рис. 1). Угол между стороной АВ МД-ячейки и осью X есть угол сдвига γ . Для сохранения постоянного числа частиц в системе использовались периодические граничные условия вдоль осей kZ , kY и вдоль направления АВ.

Угол сдвига γ изменялся дискретно с некоторым шагом $\Delta\gamma$. Одновременно с деформированием МД-ячейки производилось «виртуальное» смещение атомов вдоль оси OY:

$$\Delta y_i = \Delta\gamma \cdot x_i,$$

здесь x_i и y_i – декартовы координаты i -го атома. После чего производилось МД-моделирование системы в течение 1000 временных шагов, при этом система релаксируется в состояние равновесия. Для поддержания постоянной температуры использовался метод перенормировки скоростей. Описанный процесс моделирует квазистатическую деформацию образца.

Было проведено моделирование квазистатической деформации простого сдвига по системе скольжения $(111) \langle \bar{1}10 \rangle$ с одинаковым числом узловых плоскостей $(\bar{1}10) - n_y = 24$ и $(11\bar{2}) - n_z = 12$, и разным числом узловых плоскостей $(111) - n_x = 6, 9, 12$. При этом общее число атомов в МД-ячейке равно 864, 1296 и 1728, соответственно. Температура системы поддерживалась равной 12 К, что составляет $\approx T_{пл}/10$, где $T_{пл}$ – температура плавления аргона.

На рисунке 2 приведены кривые деформации, т.е. зависимости рассчитанного напряжения сдвига σ_6 от угла сдвига γ для кристалла с разным числом узловых плоскостей $(111) n_x = 6, 9, 12$. Расчет производился с шагом угла сдвига $\Delta\gamma = 1^\circ$. Из рисунка 2 видно, что до критического угла $\gamma_{кр} \approx 7^\circ$ напряжение сдвига возрастает практически линейно, причем результаты расчета напряжений сдвига для систем с разным числом плоскостей (111) не отличаются друг от друга. При достижении критического значения угла $\gamma_{кр}$ происходит резкое уменьшение напряжений сдвига, практически до нуля.

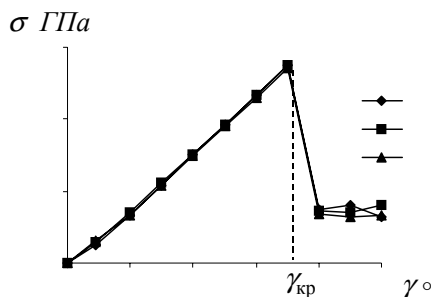


Рис. 2. Зависимость напряжения σ_6 от угла сдвига γ для образцов с разным числом плоскостей (111) ($1 - n_x = 6; 2 - n_x = 9; 3 - n_x = 12$)

Для уточнения критического угла сдвига были проведены расчеты с меньшим шагом угла сдвига $\Delta\gamma = 0.1^\circ$ в интервале углов от 6 до 8° . На рисунке 3 приведены результаты расчета кривой деформации в окрестности критического угла для разного числа плоскостей (111) и для ряда реализаций компьютерного «эксперимента», поскольку выяснилось, что значение критического угла непостоянно и наблюдается его флуктуация.

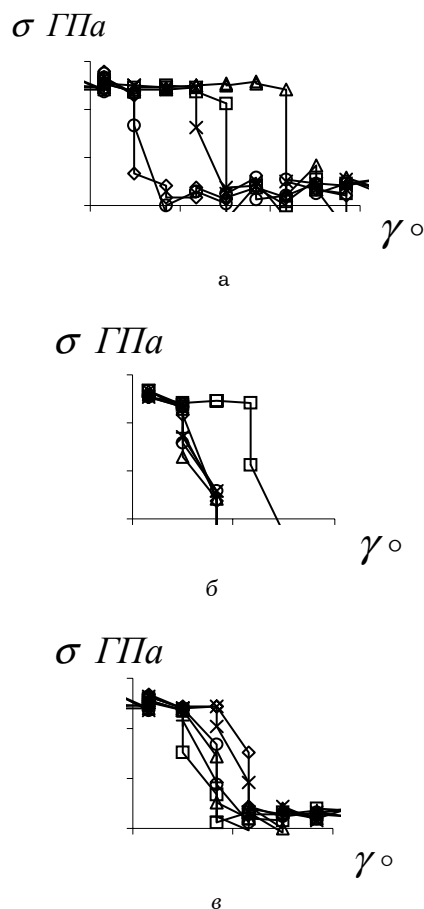


Рис. 3. Зависимость напряжения от угла деформации: а – $n_x = 6$; б – $n_x = 9$; в – $n_x = 12$

Из рисунка 3а видно, что в системе с $n_x = 6$ флуктуация критического угла составляет $\approx 0.3^\circ$, причем с увеличением числа плоскостей (рис. 4б и 4в) флуктуация уменьшается и в системе с $n_x = 9$ она составляет $\approx 0.2^\circ$, а в системе с $n_x = 12 - \approx 0.1^\circ$.

В работе был проведен анализ положений атомов узловых плоскостей. На рисунке 4 представлены положения атомов разных слоев моделируемой системы с числом плоскостей (111), равным $n_x = 6$, для состояний, соответствующих углам сдвига $3^\circ, 7^\circ, 8^\circ$ и 9° . На рисунке 4 приведены также положения атомов «седьмого» слоя, расположенного в «верхней» МД-ячейке. Как видно из рисунков 4а–4г, на каждой стадии деформации атомы каждого слоя сохраняют структуру плотноупакованной плоскости (111), т.е. можно говорить о смещении плотноупакованных плоскостей (111) как целого в процессе деформации. Первые два случая, изображенные на рисунках 4а, 4б, относятся к состояниям с докритическим углом сдвига. Как можно заметить из этих рисунков, плоскости (111) смещаются в направлении $\langle 110 \rangle$ из своих основных положений пропорционально расстоянию до нижней грани МД-ячейки.

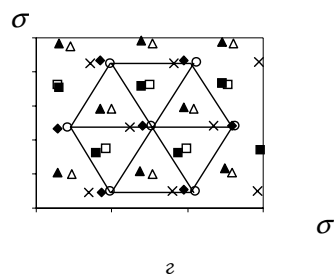
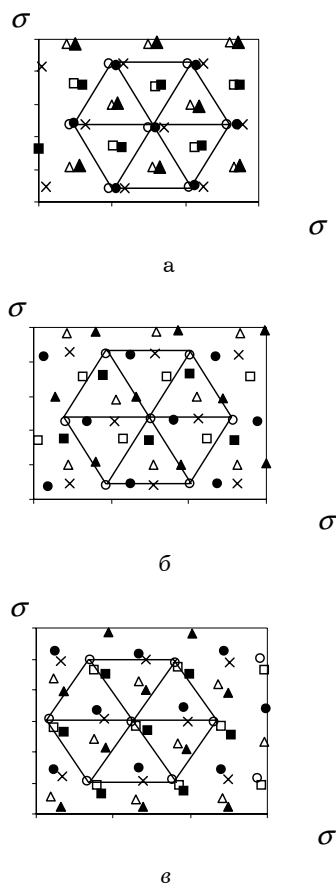


Рис. 4. Положения атомов разных слоев при разных значениях угла деформации: а – $g = 3^\circ$; б – $g = 7^\circ$; в – $g = 8^\circ$; г – $g = 9^\circ$ (o – 1 слой, D – 2 слой, ' – 3 слой, • – 4 слой, ▲ – 5 слой, n – 6 слой, x – 7 слой)

На рисунках 4в и 4г приведены положения атомов системы для состояний с углами сдвига, превышающими критический. Как видно из рисунка 4в, внешние условия по сравнению с докритическим состоянием, изображенном на рисунке 4б, изменились незначительно, о чем говорит положение атомов седьмого слоя. Однако положения атомов других слоев изменились кардинально. Так, атомы второго и пятого слоя занимают положения С, атомы третьего и шестого слоя находятся над атомами первого слоя, т.е. занимают положения А, а атомы четвертого слоя занимают положения, близкие к В. Таким образом, вместо исходного, нормального для ГЦК решетки чередования плотноупакованных плоскостей ABCABC, наблюдается чередование плоскостей: ACABCA, т.е. при достижении критического угла сдвига в кристалле произошла структурная перестройка, в результате которой возник дефект упаковки плотноупакованных плоскостей. Стоит обратить внимание на то, что это чередование плоскостей «неправильное», так как после шестого слоя А в макрорешетке снова следует слой А. Однако, как видно из рисунка 4в, атомы «седьмого» слоя при угле сдвига $\gamma = 8^\circ$ еще не дошли до своих «нормальных» для ГЦК решетки положений А (это произойдет только при угле сдвига $\gamma = 11.54^\circ$), поэтому нормальное чередование плоскостей по вертикали при данном угле сдвига еще невозможно. На рисунке 4г изображены положения атомов для угла сдвига $\gamma = 9^\circ$. Как видно из этого рисунка, атомы «седьмого» слоя при данном угле сдвига находятся значительно ближе к своим «нормальным» положениям А, и это позволило атомам всех слоев вернуться в свои «правильные» положения, в результате этого чередование плоскостей имеет правильный характер: ABCABC.

Основные результаты и выводы

1. Разработан метод, позволяющий производить компьютерное моделирование процесса квазистатической деформации простого сдвига.

2. Кривая деформации в упругой области практически линейна и не зависит от размеров МД-ячейки.

3. Флуктуации критического угла сдвига

зависят от размеров МД-ячейки: с увеличением числа плотноупакованных плоскостей флуктуации уменьшаются.

4. Установлено, что при достижении критического угла сдвига происходит возникновение дефекта упаковки плотноупакованных плоскостей (111), при дальнейшей деформации сдвига восстанавливается правильное чередование плотноупакованных плоскостей, характерное для ГЦК решетки.

Литература

1. Born M. on the stability of crystal lattice. Part I. // Proc. Camb. Phil. Soc. 1940. №2.
2. Хеерман Д.В. Методы компьютерного экспе-

римента в теоретической физике. М., 1990.

3. Судзуки Т., Есиага Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. М., 1989.