

А.В. Калинин, Д.Д. Рудер

**Определение критических параметров
начала пластической деформации в ГЦК
кристалле в системе скольжения (111) <110>**

Исследования перестройки кристаллической структуры представляют большой научный интерес, так как они могут дать детальную информацию о механизмах пластической деформации кристаллов.

Цель данной работы заключалась в том, чтобы с помощью компьютерного моделирования определить критические параметры начала пластической деформации в твердом ГЦК кристалле, при котором происходит сдвиг узловых плоскостей (111) образца под воздействием на него касательных напряжений.

В качестве конкретного метода моделирования использовался метод молекулярной динамики [1].

Для описания взаимодействия между атомами применялся потенциал парного взаимодействия Леннарда-Джонса:

$$u(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

с параметрами $\varepsilon/k_b = 119.8$, $\sigma = 3.405 \text{ \AA}$ [2].

В исходном состоянии МД-ячейка представляла собой прямоугольный параллелепипед, стороны которого параллельны декартовым осям координат – X, Y, Z. Атомы располагаются в узлах ГЦК решетки, плотноупакованные плоскости (111) которой параллельны плоскости X = 0, кристаллографические направления <110> параллельны оси OY, а направления <112> – оси OZ. Размеры МД-ячейки вдоль осей координат равнялись соответственно

$$(1/\sqrt{3}) \cdot n_x \cdot a, (\sqrt{3}/2) \cdot n_y \cdot a, \sqrt{2} \cdot n_z \cdot a,$$

где n_x – число узловых плоскостей (111); n_y – число узловых плоскостей (110); n_z – число узловых плоскостей (112).

Параметр ГЦК решетки аргона был взят равным $a = 1.5452\sigma$.

Начальные скорости атомов задавались случайно, так, что распределение атомов по скоростям соответствовало функции распределения Больцмана соответствующей температуре.

Для моделирования деформации сдвига в системе производилось постепенное сдвиговое деформирование МД-ячейки, при этом прямоугольный параллелепипед превращался в косоугольный (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 OZ, OY и вдоль направления АВ.

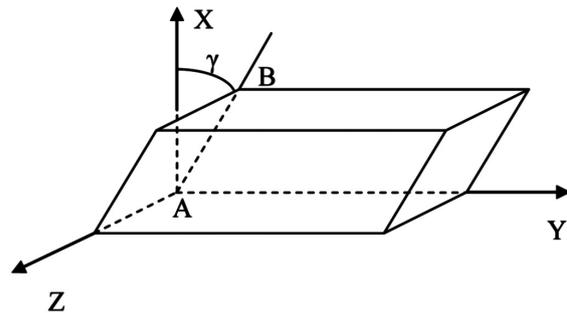


Рис. 1. МД- ячейка

Угол сдвига γ изменялся дискретно с некоторым шагом, после чего производилось МД-моделирование системы в течение 1000 временных шагов, при этом система приводилась в состояние равновесия. Описанный процесс моделирует квазистатическую деформацию образца. Для поддержания постоянной температуры использовался метод перенормировки скоростей, суть которого сводилась к добавлению энергии в систему или ее вычитанию при помощи нормировки скоростей на множитель:

$$\beta = \left[\frac{T^* (N-1)}{16 \sum_i V_i^2} \right]^{\frac{1}{2}},$$

где T^* – значение температуры; N – число атомов МД-ячейки.

Было проведено моделирование квазистатической сдвиговой деформации по системе (111) <110> с одинаковым числом узловых плоскостей (110) – $n_y = 24$ и (112) – $n_z = 12$ 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.

На рисунке 2 приведена зависимость рассчитанного напряжения сдвига σ_0 от угла сдвига γ , вычисления производились с шагом угла сдвига 1° . На рисунке

видно, что до критического угла $\gamma_{кр} \approx 7^\circ$ напряжение сдвига возрастает практически линейно, причем значения напряжений сдвига для систем с разным числом плоскостей (111) практически не отличаются друг от друга. При достижении критического значения угла $\gamma_{кр}$ происходит резкое уменьшение напряжения сдвига, практически до нуля.

Для уточнения критического угла сдвига были проведены расчеты с шагом угла сдвига 0.1° в интервале углов от 6 до 8° .

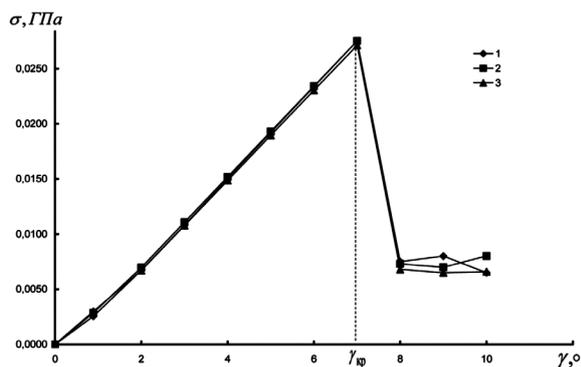


Рис. 2. Зависимость напряжения σ_6 от угла сдвига γ для образцов с разным числом плоскостей (111): 1 – $n_x = 6$; 2 – $n_x = 9$; 3 – $n_x = 12$

На рисунках 3–5 представлены зависимости напряжения системы σ_6 от угла сдвига γ . Видно, что существует область, где происходит резкое изменение значения напряжения σ_6 .

На рисунках показано, что угол, при котором происходит резкое уменьшение напряжения, имеет разброс в интервале 6.3 – 6.6° , причем с увеличением числа атомов этот разброс уменьшается. Так, в системе с шестью плотноупакованными плоскостями этот разброс составляет 0.3° , в системе с девятью – 0.2° , а в системе с 12 плоскостями – 0.1° .

По данным, полученным в результате компьютерного моделирования сдвиговой деформации, был проведен анализ кристаллической структуры образца. В результате анализа было установлено, что на каждой стадии пластической деформации атомы узловой плоскости (111) сохраняют структуру плотноупакованной плоскости, т.е. можно говорить о смещении плотноупакованных плоскостей (111) как целого в процессе пластической деформации.

Для изучения изменений, происходящих в структуре, был взят моделируемый образец с количеством плотноупакованных плоскостей, равным 6.

Были рассмотрены состояния кристаллической решетки в следующие моменты времени: 1) недеформированная решетка $\gamma = 0^\circ$; 2) состояние, предшествующее критическому углу сдвига $\gamma < \gamma_{кр}$; 3) состояние решетки в момент критического угла сдвига $\gamma = \gamma_{кр}$; 4) равновесное состояние $\gamma \ll \gamma_{кр}$.

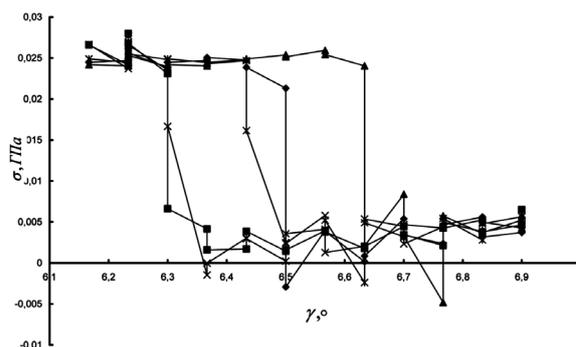


Рис. 3. Зависимость напряжения от угла деформации для системы с шестью плоскостями (111)

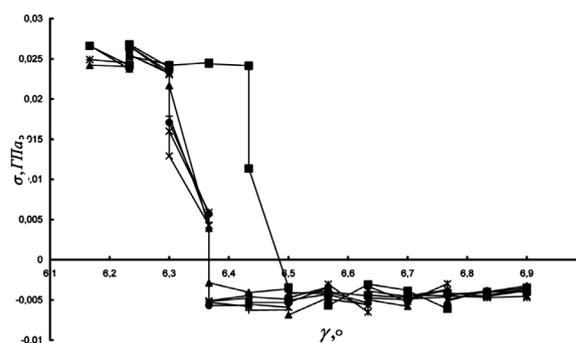


Рис. 4. Зависимость напряжения от угла деформации для системы с девятью плоскостями (111)

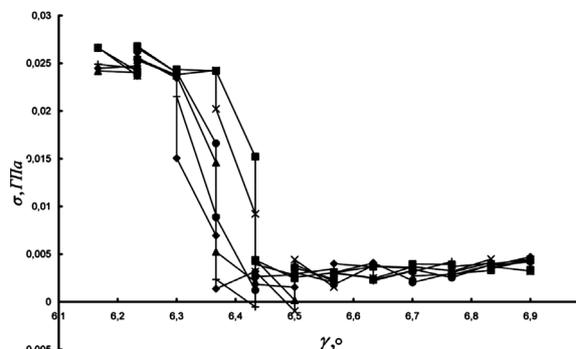


Рис. 5. Зависимость напряжения от угла деформации для системы с 12 плоскостями (111)

На рисунке 6 показаны проекции атомов шести плотноупакованных слоев (111) на плоскость YZ в начальный момент времени, плюс «седьмой» слой, расположенный в «верхней» МД-ячейке. На графике видно, что расположение атомов моделируемой системы соответствует расположению атомов плоскости (111) решетки ГЦК. Пунктирной линией показана область атомов, лежащих в одной плоскости. Промежуточные состояния, соответствующие углам сдвига 3.36° и 6.70° , показаны на рисунках 7–8. Из них видно, что при увеличении угла сдвига γ атомы каждого слоя сохраняют структуру плотноупакованной плоскости (111), т.е. можно говорить о смещении плотноупа-

кованных плоскостей (111) как целого в процессе деформации.

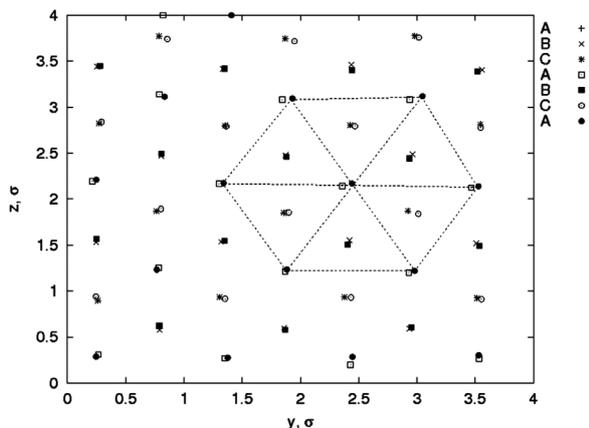


Рис. 6. Положения атомов разных слоев (111) при угле деформации $\gamma = 0^\circ$

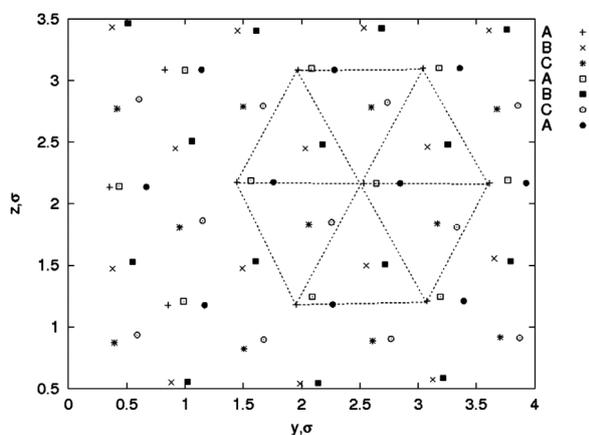


Рис. 7. Положения атомов разных слоев (111) при угле деформации $\gamma = 3.36^\circ$

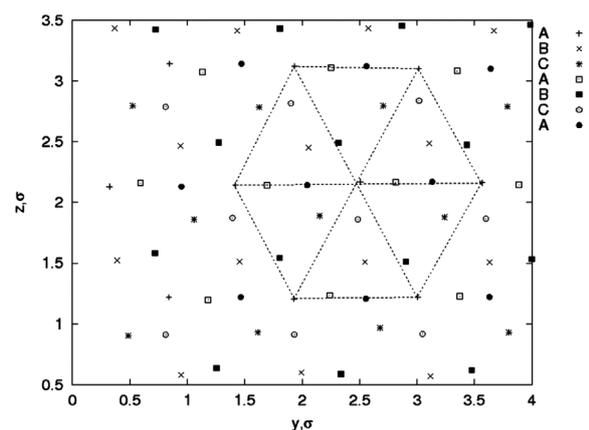


Рис. 8. Положения атомов разных слоев (111) при угле деформации $\gamma = 6.70^\circ$

Как можно видеть из этих рисунков, плоскости (111) смещаются в направлении $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ из своих основных положений пропорционально расстоянию до нижней грани МД-ячейки.

Анализ структуры показал, что атомы моделируемого образца выстраиваются в ГЦК структуру с правильным чередованием слоев ABCABCA.

На рисунке 9 приведены проекции атомов моделируемой системы для состояния с углом сдвига, превышающим критический. Показано, что состояние системы не является стабильным после перестройки системы, произошедшей после прохождения критического угла $\gamma_{кр}$.

Как видно из рисунка 8, внешние условия по сравнению с докритическим состоянием, изображенном на рисунке 9, изменились незначительно, о чем говорит положение атомов седьмого слоя. Однако положения атомов других слоев изменились кардинально. Так, атомы второго и пятого слоя занимают положения C, атомы третьего и шестого слоя находятся над атомами первого слоя, т.е. занимают положения A, а атомы четвертого слоя занимают положения, близкие к B. Таким образом, вместо исходного, нормального для ГЦК решетки чередования плотноупакованных плоскостей ABCABC наблюдается чередование плоскостей: ACABCA. Следовательно, при достижении критического угла сдвига в кристалле произошла структурная перестройка, в результате которой возник дефект упаковки плотноупакованных плоскостей (111).

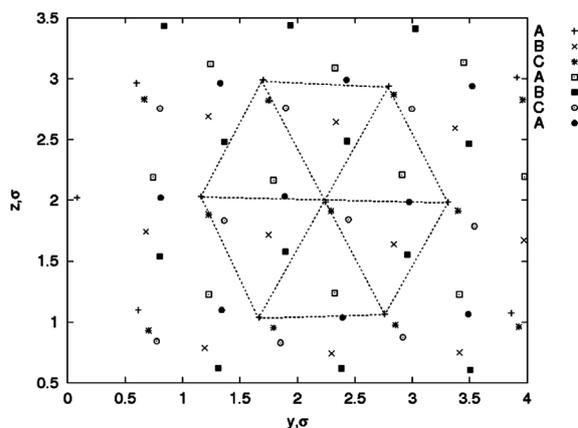


Рис. 9. Положения атомов разных слоев (111) при угле деформации $\gamma = 7.80^\circ$

Стоит обратить внимание на то, что это чередование плоскостей «неправильное», так как после шестого слоя A в макрорешетке снова следует слой A. Однако, как показывает рисунок 8, атомы «седьмого» слоя при угле сдвига $\gamma = 6.70^\circ$ еще не дошли до своих «нормальных» для ГЦК решетки положений A (это произойдет только при угле сдвига $\gamma = 8.91^\circ$, поэтому нормальное чередование плоскостей по вертикали при данном угле сдвига еще невозможно).

На рисунке 10 изображены положения атомов для угла сдвига $\gamma = 8.91^\circ$. Как видно из этого рисунка, атомы «седьмого» слоя при данном угле сдвига на-

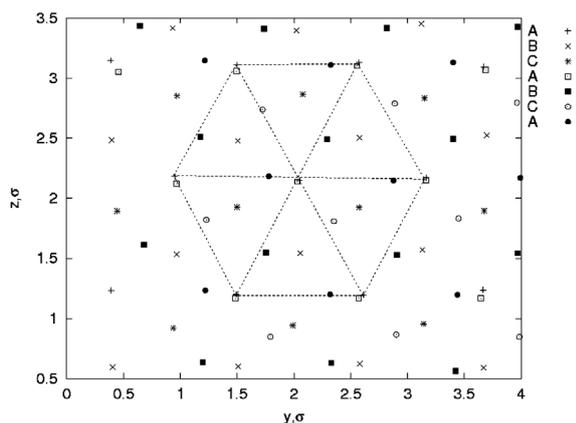


Рис. 10. Положения атомов разных слоев (111) при угле деформации $\gamma = 8.90^\circ$

ходятся 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.

Выводы:

1. Разработан метод, позволяющий рассчитывать критическое значение угла деформации $\gamma_{кр}$ при касательном напряжении.

2. Показано, что при увеличении числа атомов уменьшается интервал углов, при котором происходит падение напряжения.

3. Установлено, что при значении угла деформации γ большим, чем критический угол, в системе происходит перестройка атомных плоскостей и(или) появление дефектов упаковки.

Библиографический список

1. Хеерман, Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д.В. Хеерман. М., 1990.
2. Клименко, В.Ю. Структура фронта ударной волны в твердом теле / В.Ю. Клименко, А.Н. Дремин // ДАН СССР. – 1980. – Т. 251, №6.
3. Калинин, А.В. Порошковые и композиционные металлические материалы / А.В. Калинин, Д.Д. Рудер // Экс-

периментальные методы в физике структурно-неоднородных сред : труды Всерос. науч.-техн. конф. – Барнаул, 1997.

4. Калинин, А.В. Физическая мезомеханика материалов / А.В. Калинин // Физическая мезомеханика материалов : тезисы докл. 2-й Всерос. конф. молодых ученых. – Томск, 1999.