

## О ВОЗМОЖНОСТИ ВИХРЕВОГО МЕХАНИЗМА ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ГРАНИЦ ЗЁРЕН ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ СДВИГОВОМ НАГРУЖЕНИИ

С. Г. Псахье, К. П. Зольников

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск

Численно изучено поведение границ зёрен специального типа в материале при высокоскоростном сдвиговом нагружении. Обнаружено два пути эволюции моделируемой системы: при высоких скоростях деформации происходит интенсивная перестройка структуры межзёренной границы; при понижении интенсивности нагружения процесс релаксации закачиваемой в материал энергии осуществляется перемещением границы. Расчеты показали, что межзёренная граница может смещаться с аномально высокой скоростью. Вихревое коллективное движение атомов обуславливает высокие скорости перемещения границы зёрен.

Изучение подвижности границ зёрен в материалах при высокоэнергетических воздействиях является сложной проблемой [1], поскольку не существует экспериментальных методов, позволяющих достаточно надежно следить за поведением границ зёрен в материале в условиях динамического нагружения. В этой связи значительный интерес представляет численное моделирование. Отметим, что вследствие гетерогенности структуры реальных материалов механическое нагружение практически всегда приводит к появлению в локальных областях, в частности на границах зёрен, сдвиговых компонентов деформации. Поэтому в настоящей работе исследовалось влияние высокоскоростного сдвигового нагружения на возможность атомных механизмов перемещения границ зёрен.

Моделирование проводили для трехмерного кристаллита Al (свыше 6 000 атомов), содержащего границу зёрен специального типа  $\Sigma 7$ . Оси координат были направлены вдоль следующих кристаллографических направлений: ось  $OX$  — вдоль  $\langle 111 \rangle$ ,  $OY$  — вдоль  $\langle 211 \rangle$ ,  $OZ$  — вдоль  $\langle 011 \rangle$ . Граница зерна находилась в центральной области образца и была ориентирована перпендикулярно оси  $OX$ . В направлениях  $OY$  и  $OZ$  использовались периодические граничные условия, а края образца в направлении  $OX$  смещались с постоянной скоростью:

$$V_x = V_z = 0, \quad V_y^l = -V_y^r = \text{const},$$

где  $V_y^l, V_y^r$  —  $y$ -составляющие скорости на левом и правом краях образца соответственно.

При микроскопических расчетах обычно

используют атомную систему единиц [2], в которой боровский радиус, постоянная Планка, масса и заряд электрона равны 1. Межатомное взаимодействие для Al описывалось на основе теории псевдопотенциала [3]. Расчеты проводили с использованием уникального программного комплекса «Monster MD» [4].

Результаты расчетов показали, что характер поведения границы зёрен в материале при динамическом нагружении определяется скоростью приложенного сдвига. Так, при скорости сдвига выше 200 м/с, граница зёрен данного типа не перемещается. При этом в области границы формируется коллективное вихреобразное движение атомов [4]. Оно сопровождается интенсивными межплоскостными переходами атомов, что ведет к образованию многочисленных дефектов структуры [5].

С уменьшением скорости сдвигового нагружения до 100 м/с граница зёрен перемещается вдоль образца в направлении  $OX$  (рис. 1). Вихреобразный характер движения атомов в зернограничной области для одного из атомных слоев, перпендикулярного оси  $OZ$ , за различные отрезки времени показан на рис. 2. Проведенные оценки показали, что скорость перемещения границы может достигать 600 м/с.

Необходимо подчеркнуть, что граница зёрен начинает перемещаться только после того, как сформируется характерное вихреобразное движение атомов. Анализ атомных траекторий указывает на то, что вихреобразное движение атомов смещается вместе с границей зёрен и, в конечном счете, обеспечивает перестройку атомной структуры и обуславливает

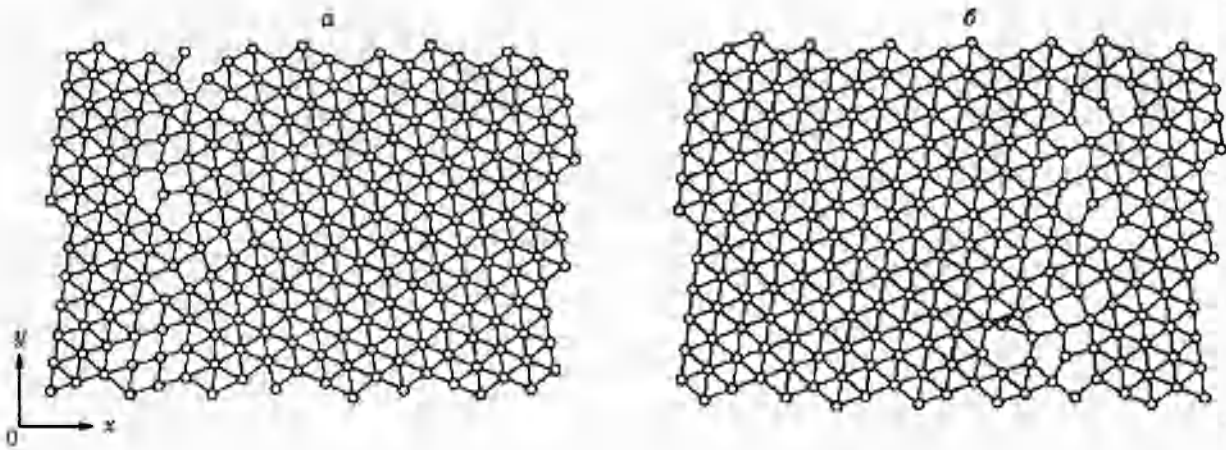


Рис. 1. Положение межзеренной границы для одной из атомных плоскостей в различные моменты времени:  
 $t = 0$  (а), 250 000 а.е. (б)

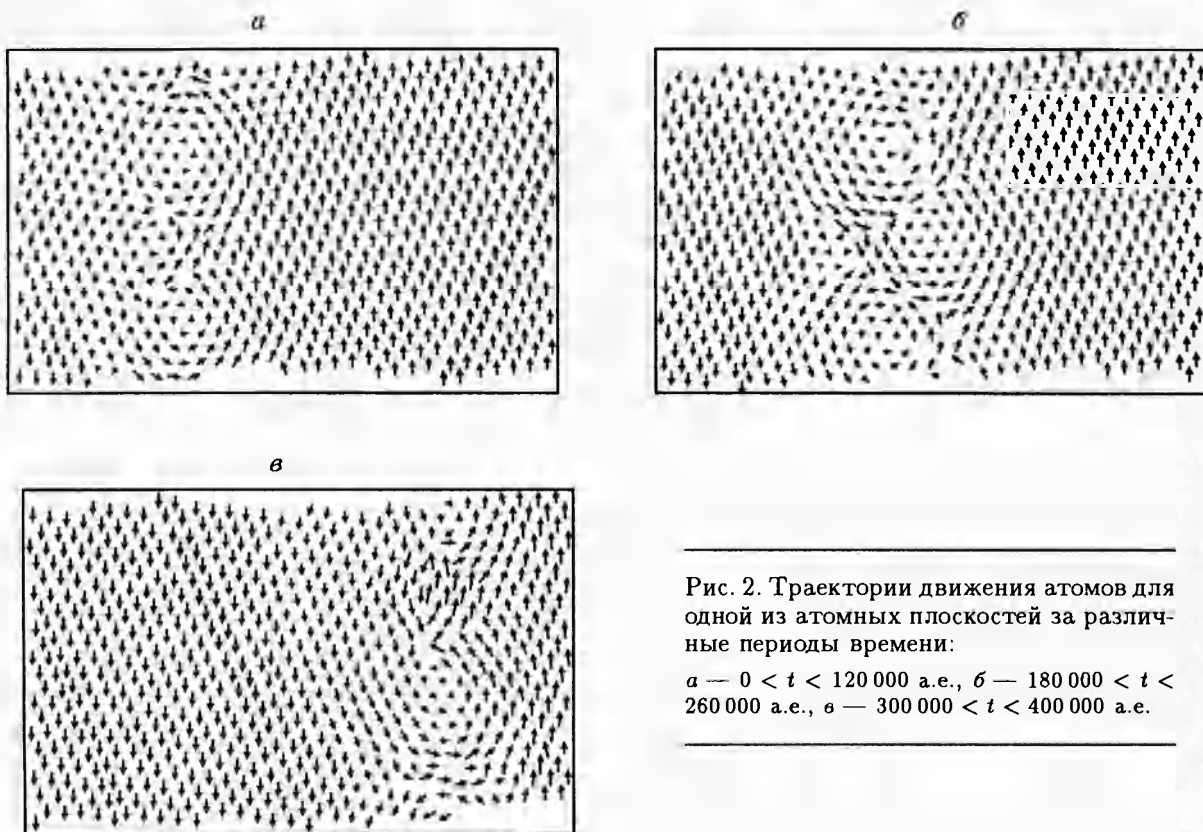


Рис. 2. Траектории движения атомов для одной из атомных плоскостей за различные периоды времени:  
 $a - 0 < t < 120\,000$  а.е.,  $б - 180\,000 < t < 260\,000$  а.е.,  $в - 300\,000 < t < 400\,000$  а.е.

аномально высокую скорость перемещения границы (см. рис. 2).

Таким образом, расчеты, проведенные для высокоскоростного сдвигового нагружения, позволили указать два пути эволюции моделируемой системы. В первом случае (высокие скорости деформации) происходит интенсивная перестройка структуры межзёренной границы, что ранее наблюдалось в [5]. Во втором случае процесс релаксации закачиваемой в материал энергии осуществляется перемещением границы зёрен.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **High Pressure Shock Compression of Condensed Matter** / R. A. Graham (Ed.). New York: Springer-Verlag, 1995.
2. **Теория фаз в сплавах** / В. Е. Панин, Ю. А. Хон, В. И. Наумов и др. Новосибирск: Наука, 1984.
3. **Harrison W. A.** Pseudopotential in Theory of Metals. New York, Amsterdam, 1966.
4. **Psakhie S. G., Korostelev S. Yu., Negreskul S. I., et. al.** Vortex mechanism of plastic deformation of grain boundaries. Computer simulation // *Phys. Status Solidi. B.* 1993. V. 176. P. 41-44.
5. **Zolnikov K. P., Psakhie S. G., Negreskul S. I., Korostelev S. Yu.** Computer simulation of plastic deformation in grain boundary region under high rate loading // *J. Mater. Sci. Technol.* 1996. V. 12, N 3. P. 235-237.

*Поступила в редакцию 2/XI 1997 г.*