

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРНОГО СОСТОЯНИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ МЕХАНИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ

С. Г. Псахье, К. П. Зольников, Д. Ю. Сараев

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634048 Томск

Проведено молекулярно-динамическое моделирование поведения трехмерного кристаллита, содержащего границу зерен специального типа в условиях сдвигового нагружения. Обнаружено, что аккомодация смещений зерен материала может осуществляться за счет структурных изменений межзеренных границ. Кристаллообразная структура зерен может восстанавливаться после прекращения внешнего воздействия. Полученные результаты позволяют глубже понять природу структурного отклика материала при механических нагружениях на атомном уровне.

Известно, что высокоскоростное нагружение может приводить к существенным структурным изменениям в реальных материалах [1, 2]. При этом вследствие гетерогенности их структуры отдельные блоки и зерна могут испытывать значительные сдвиговые деформации. Необходимо отметить, что именно со сдвиговым нагружением связывается ряд необычных откликов материала, имеющих существенно нелинейную природу. Так, в [3, 4] отмечалось, что под действием высокоскоростного сдвига возникает коллективное вихреобразное движение атомов в области межзеренных границ. При этом в определенном интервале скоростей сдвига межзеренная граница может перемещаться с аномально высокими скоростями, достигающими значений 600 м/с [4]. Результаты, представленные в [3, 4], были получены для низких температур. В то же время структурный отклик межзеренной области на высокоскоростное механическое нагружение при комнатной и высокой температурах может иметь свои особенности. Поэтому настоящая работа посвящена изучению высокоскоростного воздействия на поведение границ специального типа при комнатной температуре. Выбор таких границ обусловлен тем, что их свойства чувствительны к температурным изменениям [5].

Исследовали трехмерный кристаллит Al, содержащий границу зерен специального типа $\Sigma 7$. Размеры кристаллита в направлении осей OX , OY , OZ составляли 167, 65 и 40 а. е. соответственно. (Как отмечалось в [6, 7], использование атомной системы единиц при микроскопических исследованиях до-

статочно удобно). Координатные оси были направлены вдоль следующих кристаллографических направлений: ось OX — $\langle 01\bar{1} \rangle$, OY — $\langle 2\bar{1}1 \rangle$, OZ — $\langle 111 \rangle$. Моделируемый кристаллит содержал более $4 \cdot 10^3$ атомов. Исследования проводили на основе метода молекулярной динамики с использованием программного комплекса «MONSTER MD». Межатомное взаимодействие рассчитывали в рамках метода псевдопотенциала [8].

Граница зерен находилась посередине образца перпендикулярно оси OX . В направлениях OY и OZ использовались периодические граничные условия, а края образца в направлении OX смещались с постоянной скоростью

$$V_x = V_z = 0, \quad V_y^l = -V_y^r = -200 \text{ м/с},$$

где V_y^l и V_y^r — составляющие скорости на левом и правом краях образца соответственно. Все исследования проводили при комнатной температуре.

Расчеты показали, что структура межзеренной области существенно меняется в условиях интенсивного сдвигового нагружения. При этом атомы, находящиеся в области границы зерен, вытесняются из соответствующих атомных плоскостей (рис. 1).

Вид функций радиального распределения (ФРП) для межзеренной области в начальный момент времени и в процессе нагружения приведен на рис. 2. Из сравнения рис. 2, а и 2, б видно, что под воздействием приложенного нагружения происходит разупорядочение структуры межзеренной границы. Следует отметить, что процесс перестройки межзеренной области сопровождается значительными атомными сме-

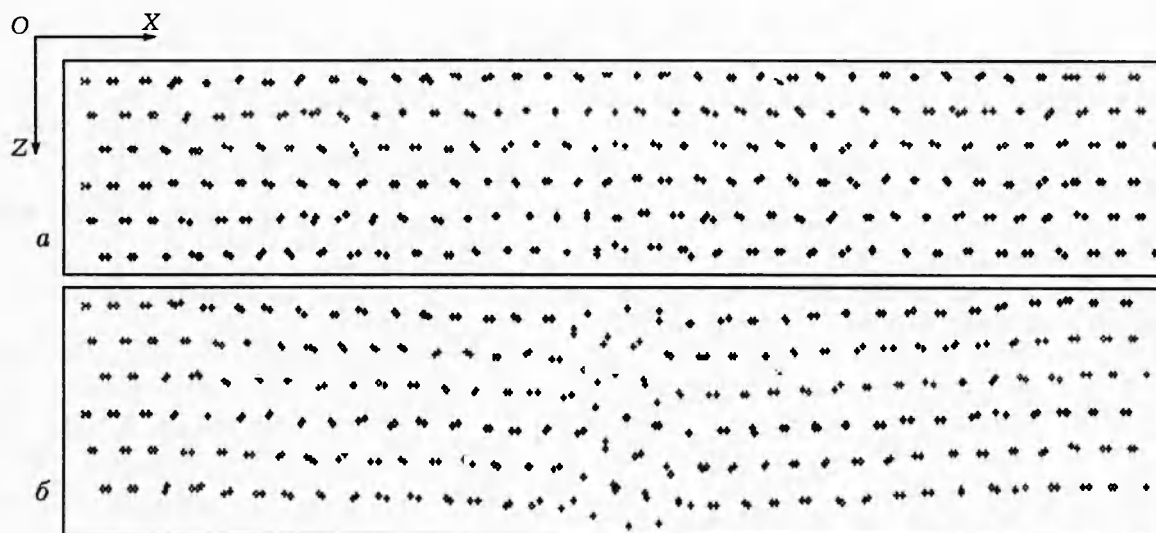


Рис. 1. Проекция структуры образца на плоскость XOZ в начальный момент времени (а) и для $t = 120000$ а. е. (б):

сплошные линии — границы зерна

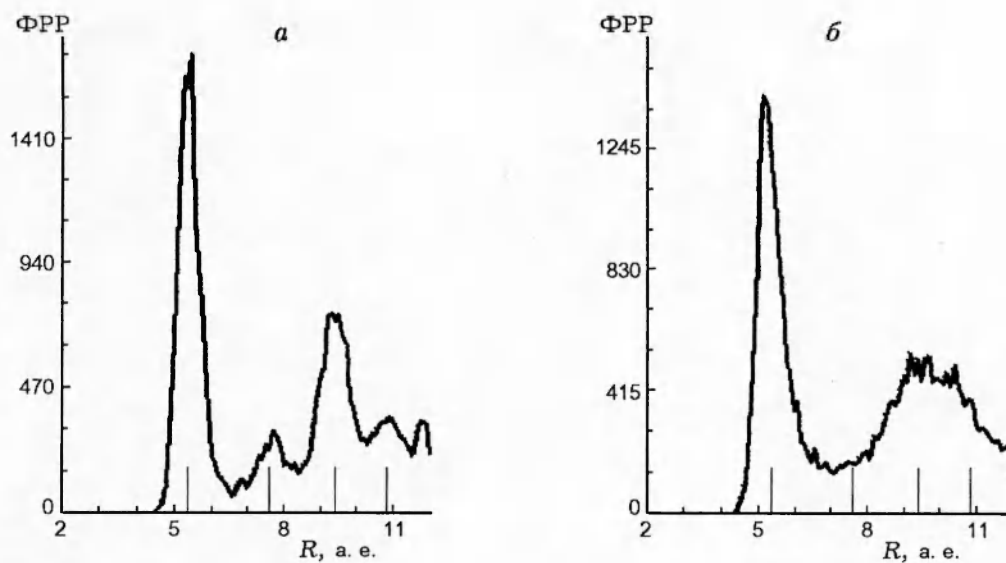


Рис. 2. Функция радиального распределения атомов образца для $t = 0$ (а) и $t = 120000$ а. е. (б)

щениями, соизмеримыми с межплоскостными расстояниями, что хорошо видно из сравнения рис. 1,а и 1,б. В то же время результаты моделирования показывают, что структура самих зерен существенно не изменяется и, несмотря на некоторое размытие пиков функций радиального распределения, сохраняет выраженный кристаллический характер.

Моделирование поведения образца после прекращения сдвигового воздействия и последующая релаксация при той же температуре, приводят к восстановлению в межзеренной области структуры кристаллического типа. При этом атомы из межплоскостных положений возвращаются в атомные плоскости, а функция радиального распределения принимает вид, близкий к виду, приведенному на рис. 2,а, однако полностью к своему первоначальному виду межзеренная граница не релаксирует.

Таким образом, при высокоскоростном механическом нагружении поликристаллических материалов аккомодация взаимного сдвигового смещения зерен может осуществляться путем структурных изменений в области межзеренных границ. Данный эффект носит динамический характер.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hess S. Shear-induced melting and reentrant positional ordering in a system of spherical particles // Intern. J. Thermophys. 1985. V. 6, N 6. P. 657–671.
2. Kato M., Pak H. Thermodynamics of stress-induced first-order phase transformations in solids // Phys. Status Solidi. 1984. V. B123. P. 415–424.
3. Псахье С. Г., Коростелев С. Ю., Негрескул С. И. и др. Вихревой механизм пластической деформации границ зерен. Компьютерный эксперимент // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20, вып. 1. С. 36–39.
4. Псахье С. Г., Зольников К. П. Об аномально высокой скорости перемещения границ зерен при высокоскоростном сдвиговом нагружении // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23, вып. 14. С. 44–47.
5. Артемьев А. В., Фионова Л. К. Изменение морфологии границ зерен в алюминии при нагреве // Физика металлов и металловедение. 1988. Т. 66, вып. 1. С. 132–136.
6. Harrison W. A. Pseudopotentials in theory of metals. New York; Amsterdam, 1966.
7. Сена Л. А. Единицы физических величин и их размерности. М.: Наука, 1977.
8. Теория фаз в сплавах / В. Е. Панин, Ю. А. Хон, В. И. Наумов и др. Новосибирск: Наука, 1984.

Поступила в редакцию 6/1 1999 г.