

ОСОБЕННОСТИ НАНОСКОПИЧЕСКОГО ОТКОЛЬНОГО РАЗРУШЕНИЯ ВБЛИЗИ ГРАНИЦЫ ЗЕРНА

К. П. Зольников, Т. Ю. Уваров, А. Г. Липницкий,
Д. Ю. Сараев, С. Г. Псахье

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск

Проведено численное моделирование откольного разрушения в кристаллите меди с межзеренной границей специального типа при импульсном нагружении. Обнаружено, что граница зерна изменяет параметры нелинейных волн, генерируемых нагружением, и существенно влияет на характер откольного разрушения.

Вопросы, связанные с изучением механизмов наноскопического откольного разрушения материалов в условиях высокоэнергетического воздействия, актуальны как с научной, так и с практической точки зрения [1, 2]. В работах [3–5] показано, что в материале с кристаллической структурой импульсное нагружение (высокоскоростное механическое нагружение, быстрый локальный разогрев свободной поверхности электронными пучками и т. д.) может генерировать уединенные импульсы сжатия (УИС) [3, 6], распространяющиеся на большие расстояния без потери энергии [7, 8]. Взаимодействие УИС с тыльной поверхностью может сопровождаться процессами разрушения, и в частности откольным разрушением. Данная проблема представляет интерес для микроэлектроники, где в тонких металлических пленках реализуются импульсы тока с высокой плотностью, что может служить причиной генерации УИС. Учет реальной структуры, в частности наличие в приповерхностной области материала структурных дефектов таких, как границы раздела, может менять характер взаимодействия УИС со свободной поверхностью.

На основании вышесказанного в настоящей работе поставлена следующая задача: исследовать влияние границы зерна, расположенной вблизи тыльной поверхности кристаллита, на откольные процессы при импульсном нагружении. В качестве модельного материала использован кристаллит меди. Расчеты проводили на основе метода молекулярной динамики [3–5]. Межатомные взаимодействия описаны в рамках метода погруженного атома [9–12].

Моделируемый кристаллит меди содержал более 12000 атомов и состоял из двух зерен

с идеальной ГЦК-структурой. Относительный поворот зерен вокруг оси [111] составлял $38,21^\circ$ (граница специального типа $\Sigma 7$). Межзеренная граница ориентирована параллельно свободной поверхности и удалена от нее на 24 межплоскостных расстояния.

Ось X соответствовала направлению $[01\bar{1}]$, ось Y — $[2\bar{1}\bar{1}]$ и ось Z — направлению $[111]$ в первом зерне. Начальные и граничные условия формулировались следующим образом. Со стороны нагружения задавалось жесткое граничное условие, а с противоположной стороны — свободная поверхность. Вдоль направлений, перпендикулярных направлению приложения нагрузки, использовались периодические граничные условия. Для моделирования внешнего нагружения атомам образца, находящимся на грани, перпендикулярной оси X , присваивалась постоянная скорость вдоль направления OX .

Описанное воздействие приводит к формированию нескольких УИС и фонового теплового возмущения. Для исключения последнего в локальной области образца задавалось такое распределение начальных атомных смещений и скоростей, при котором формируется только один УИС.

Расчеты показали, что откольные процессы на тыльной поверхности вышеописанного кристаллита начинаются при скоростях нагружения выше 1700 м/с. При импульсном нагружении в образце генерируются УИС с амплитудами $2300 \div 4500$ м/с (см. таблицу). Проходя межзеренную границу, УИС частично рассеиваются. Структура фрагмента образца, содержащего границу зерна, до и после откола показана на рис. 1. Откалываемая часть выделена более темным

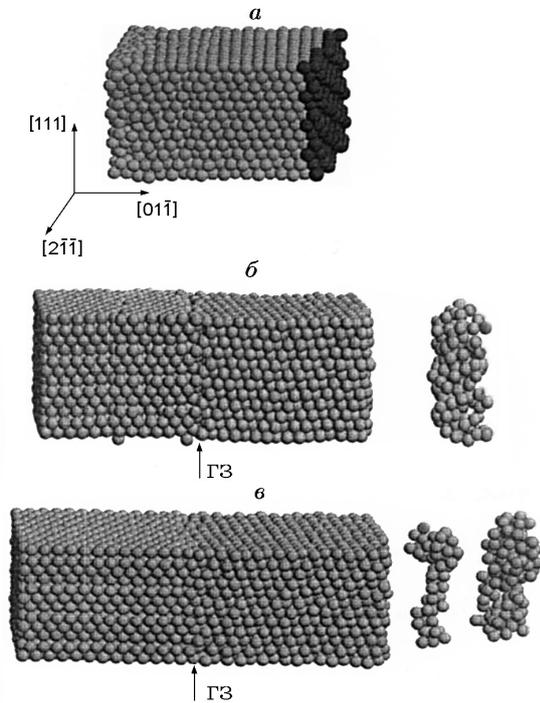


Рис. 1. Фрагмент образца с границей зерна (ГЗ) до откола (а), после откола, инициированного УИС (б), и после откола, инициированного УИС с учетом фонового возмущения (в)

цветом (см. рис. 1,а). Энергия УИС, переданная отколовшейся части, перераспределяется в ней. Характерное распределение атомных скоростей в направлении отлета показано на рис. 2.

В таблице приведены основные параметры моделируемой системы. Видно, в частности, что скорость откола увеличивается с ростом амплитуды УИС, при этом прирост скорости отколовшейся части постепенно уменьшается. Такое поведение может быть обусловлено тем, что при переходе через область границы зерен с ростом амплитуды уединенного импульса сжатия усиливается процесс перераспределения переносимой им энергии. Это проявляется в том, что все большая доля кинетической энергии УИС трансформируется в потенциальную энергию взаимодействия атомов и рассеивается в виде тепловых колебаний.

Наличие межзеренной границы в образце существенно изменяет характер взаимодействия УИС со свободной поверхностью. Начиная с порогового значения амплитуды и до ее значения 3300 м/с, доля импульса, переданная в отколовшуюся часть, растет, достигая максимума (см. таблицу). При дальнейшем увеличении нагружения все большая доля УИС рассеивается в межзеренной области, а доля импульса, переданная отколовшейся части, начинает уменьшаться.

Характеристики откольного разрушения, инициированного УИС

w , м/с	f , м/с	v , м/с	sv , м/с	sr , 10^{-10} м	p
1750	2300	900	540* 505**	2,52* 3,15**	0,24
1970	2900	1880	470* 540**	1,24* 1,77**	0,44
2190	3300	2250	470* 510**	1,06* 1,66**	0,49
2410	3700	2450	470* 490**	1,32* 1,77**	0,49
2630	4200	2600	475* 535**	1,22* 1,98**	0,48
2840	4500	2750	500* 570**	1,57* 2,53**	0,46

Примечание. * расчеты проведены через $1,2 \cdot 10^{-12}$ с, ** через $2,4 \cdot 10^{-12}$ с после начала откольного разрушения, w — скорость нагружения, f — амплитуда УИС, v — средняя скорость отлета, sv — квадратичное отклонение от средней скорости отлета, sr — квадратичное отклонение от центра масс отколовшейся части, p — доля импульса УИС, переданная отколовшейся части.

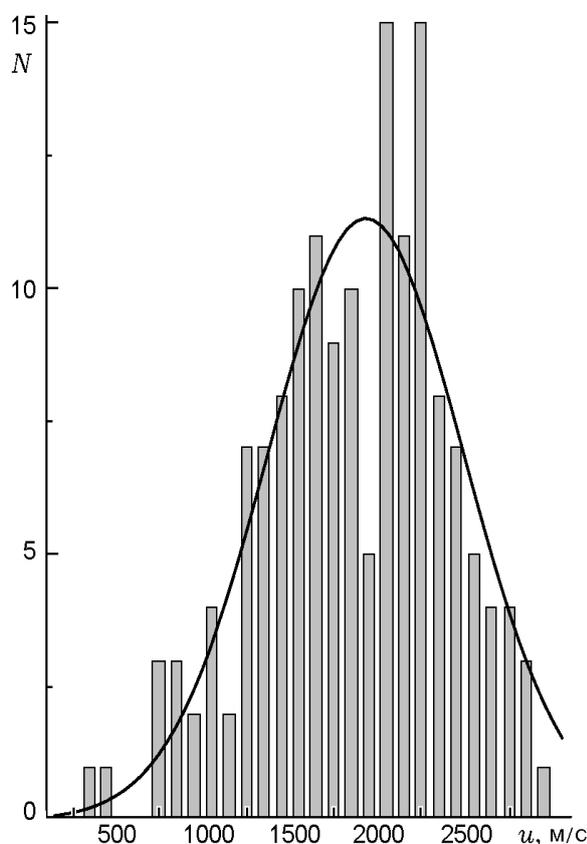


Рис. 2. Распределение скорости атомов (u) в направлении отлета в отколовшейся части кристаллита:

N — число атомов

Расчеты показали, что отклонение от средней скорости в направлении отлета со временем увеличивается (см. таблицу). По-видимому, существует тенденция распада отколовшейся части образца. На это указывает также ее постепенное расширение в направлении OX (см. таблицу).

Отметим, что влияние фонового теплового возмущения наиболее существенно вблизи порогового значения i , в частности, приводит к распаду отколовшейся части (см. рис. 1, б, в). Расчеты показали, что скорость отлета одной из них становится близкой к нулю, вторая же часть удаляется от образца с постоянной скоростью. Кроме того, учет фонового теплового возмущения приводит к большему среднеквадратичному отклонению по координатам от центра масс в отколовшейся части по сравнению с расчетами для УИС.

Сравнительный анализ откольного разрушения в идеальном кристалле и в кристаллите с межзеренной границей показал следующие

отличия. В идеальном кристалле вследствие плоского фронта УИС всегда откалывается одна или несколько атомных плоскостей, количество которых зависит от величины нагружения и от кристаллографического направления распространения УИС. При этом фоновое тепловое возмущение практически не влияет на особенности откольного разрушения. В кристаллите с межзеренной границей отколовшаяся часть имеет более сложные геометрические очертания (см. рис. 1, а) и структурную эволюцию в процессе отлета (см. рис. 1, б). Кроме того, как отмечалось выше, воздействие фонового теплового возмущения может привести к существенному изменению характера откола (см. рис. 1, в).

Таким образом, в работе показано, что граница зерна нелинейным образом влияет на процесс откольного разрушения. Наиболее сильно это проявляется при пороговых нагружениях с учетом теплового фонового возмущения. В то же время размеры и геометрия откола от тыльной поверхности образца практически не изменяются с ростом амплитуды УИС. Существует тенденция распада отколовшейся части образца на отдельные куски со временем ввиду нарастающего разброса атомных скоростей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
2. Никифоровский В. С., Шемякин Е. И. Динамическое разрушение твердых тел. Новосибирск: Наука, 1979.
3. Псахье С. Г., Зольников К. П., Коростелев С. Ю. О нелинейном отклике материала при высокоскоростной деформации. Атомный уровень // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21, вып. 13. С. 1–5.
4. Псахье С. Г., Зольников К. П., Сарев Д. Ю. Локальная структурная неустойчивость и формирование тепловых пятен в материалах при механическом нагружении // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33, № 2. С. 143–146.
5. Псахье С. Г., Зольников К. П., Сарев Д. Ю. Нелинейные эффекты при динамическом нагружении материала с дефектными областями // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24, вып. 3. С. 42–46.
6. Псахье С. Г., Зольников К. П., Кадыров Р. И. и др. О возможности формирования солитонобразных импульсов при ионной имплантации // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25, вып. 6. С. 7–12.

7. Зольников К. П., Кадыров Р. И., Наумов И. И. и др. О возможности нелинейного распространения тепловых импульсов в твердых телах при дебаевских температурах // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25, вып. 6. С. 12–16.
8. Псахье С. Г., Сараев Д. Ю., Зольников К. П. Об изменении структурного состояния границ зерен при высокоскоростном механическом нагружении // Физика горения и взрыва. 1998. Т. 34, № 3. С. 123–125.
9. Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S. Embedded-atom-method for the FCC metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. 1986. V. B33, N 12. P. 7983–7991.
10. Берч А. В., Липницкий А. Г., Чулков Е. В. Поверхностная энергия и многослойная релаксация поверхности ГЦК-переходных металлов // Поверхность. 1994. № 6. С. 23–31.
11. Eremeev S. V., Lipnitskii A. G., Potekaev A. I. and Chulkov E. V. Diffusion activation energy of point defects at the surfaces of FCC metals // Phys. of Low-Dimensional Structures. 1997. N 3/4. P. 127–133.
12. Русина Г. Г., Берч А. В., Складнева И. Ю. и др. Колебательные состояния на вицинальных поверхностях алюминия, серебра и меди // Физика твердого тела. 1996. Т. 38, № 4. С. 1120–1141.

Поступила в редакцию 28/VIII 1999 г.
