

ИССЛЕДОВАНИЕ САМОДИФФУЗИИ И СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН КРУЧЕНИЯ В Ni В УСЛОВИЯХ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Г.М. Полетаев, Д.В. Дмитриенко, М.Д. Старостенков, Б.В. Семкин

Методом молекулярной динамики исследуется самодиффузия и структурные превращения вблизи границ зерен кручения (100), (110), (111) в Ni в условиях одноосной деформации. Показано, что растяжение бикристалла вдоль плоскости границы кручения приводит к более значительной интенсификации зернограницной диффузии, обусловленной трансформацией дислокационной сетки, чем при деформации в направлении перпендикулярном границе.

Ключевые слова: молекулярная динамика, граница кручения, деформация, винтовая дислокация, дислокационная сетка, атомные смещения.

Введение

В ряде современных технологических операций по обработке металлических материалов давлением (прокатка, ковка, прессование и др.) применяют высокоскоростные режимы деформирования. Диффузионные свойства деформированных металлов и сплавов зависят от величины деформации и скорости деформирования. При этом границы зерен оказывают существенное влияние на диффузию и деформационное поведение поликристаллов, однако механизм влияния деформации на диффузию по различным кристаллографически определенным границам зерен изучен слабо, тем более на атомном уровне. Кроме того, безусловный интерес представляет атомный механизм пластической деформации с участием границ зерен.

Малоугловые границы кручения, как известно, имеют упорядоченную структуру, представляющую собой сетку винтовых дислокаций [1, 2]. В работе [3] нами была проведена идентификация винтовых дислокаций в границах кручения (100), (110), (111) в ГЦК металлах на примере Ni, Cu, Al. Показано, что границы (100) содержат квадратную сетку винтовых дислокаций $1/2\langle 110 \rangle$; границы (110) – прямоугольную сетку винтовых дислокаций двух типов: $1/2\langle 110 \rangle$ и $1\langle 100 \rangle$; границы (111) – гексагональную сетку винтовых дислокаций $1/4\langle 112 \rangle$. С увеличением угла разориентации размеры ячеек дислокационной сетки уменьшаются. В центре ячеек сетки структура соответствует практически идеальному кристаллу.

В работах [4, 5] описаны результаты исследования методом молекулярной динамики самодиффузии по границам кручения (100), (110), (111) в ГЦК металлах Ni, Cu, Al. Показано, что самодиффузия по малоугловым границам кручения осуществляется посредством образования цепочек смещенных атомов вдоль ядер зернограницных винтовых дислокаций. Причем местами инициации цепочек атомных смещений выступают узлы дислокационной сетки. Цепочки атомных смещений зачастую имеют замкнутую форму. Это связано с тем, что в таком случае рекомбинирует пара избыточных точечных дефектов, – вакансии и междоузельный атом, – образующихся в соседних узлах дислокационной сетки при возникновении цепочки смещенных атомов вдоль ядра дислокации от одного узла к другому. Энергии активации диффузии по границам (100), (110), (111), полученные в работе [5], сильно отличаются друг от друга. Наибольшей диффузионной проникаемостью (минимальной энергией активации) обладают границы (110). Наименьшей – границы (111). С ростом угла разориентации энергия активации падает.

Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики самодиффузии и структурных превращений вблизи границ зерен кручения (100), (110), (111) в Ni в условиях одноосной деформации.

Описание модели

Граница зерен кручения создавалась в середине расчетного блока путем поворота двух ГЦК кристаллов (двух половин блока) на угол разориентации θ вокруг оси, перпенди-

кулярной границе (рис.1). Рассматривались три варианта плоскости границы (на рис.1 плоскость границы выделена серым цветом): (100), (110), (111). Получающийся расчетный блок обрезался таким образом, чтобы он приобрел форму параллелепипеда и не содержал по краям пустот. Затем проводилась динамическая релаксация структуры, в ходе которой бикристалл переходил в равновесное состояние. В завершении релаксации выполнялась процедура охлаждения до 0 К.

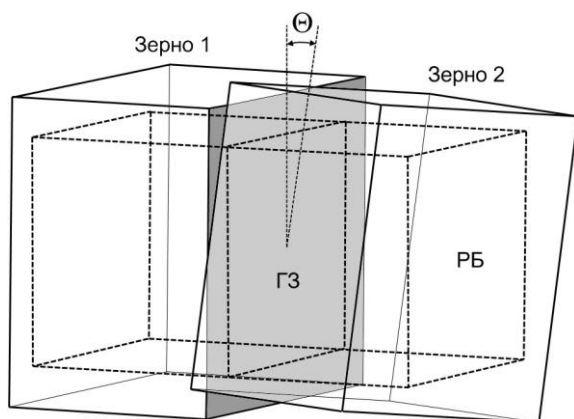


Рисунок 1 - Схема создания расчетного блока с границей зерен кручения. θ – угол разориентации; ГЗ – граница зерен (серым цветом выделена плоскость границы); РБ – конечный расчетный блок (отмечен пунктирным контуром).

Граничные условия задавались по всем осям жесткие, то есть крайним атомам расчетного блока не позволялось двигаться. Такой тип условий позволяет сохранить положение границы зерен с заданными изначально геометрическими параметрами. Количество атомов в расчетном блоке составляло около 30000. Шаг интегрирования по времени движения частиц в методе молекулярной динамики варьировался от 1 до 10 фс.

Межатомные взаимодействия описывались многочастичным потенциалом Клери-Розато [6]. Параметры потенциала для Ni были взяты из работы [6].

При определении коэффициентов самодиффузии проводились компьютерные эксперименты продолжительностью 0,2 нс, в течение которых температура расчетного блока оставалась постоянной. В завершении, для исключения тепловых смещений атомов, проводилось охлаждение блока до 0 К. Коэффициент диффузии вдоль оси X рассчитывался по формуле

$$D_x = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_{0i} - x_i)^2}{2t},$$

где x_{0i} – координата начального положения i -го атома; x_i – координата i -го атома в момент времени t ; N – число атомов в расчетном блоке. Коэффициенты диффузии вдоль осей Y и Z рассчитывались аналогично. Средний коэффициент самодиффузии находился как среднее арифметическое значений D_x , D_y и D_z . При определении коэффициента диффузии по границе зерен полагалось, что граница имеет толщину 5 Å. Такая толщина была выбрана не случайно: как известно, в кристаллах, содержащих границы зерен, основные диффузионные процессы протекают вблизи межзеренной границы в малом слое толщиной порядка 5 Å [7, 8]. В некоторых справочниках, например [7, 8], коэффициенты диффузии и энергии активации приводятся именно для такой толщины.

Одноосная деформация задавалась в начале компьютерного эксперимента путем изменения соответствующих межатомных расстояний вдоль одного направления. Рассматривались деформации вдоль осей X (перпендикулярно границе зерен) и Y (вдоль границы).

Поскольку наличие свободной поверхности в модели в значительной степени влияет на вероятность образования пластических сдвигов в расчетном блоке, в работе рассматривались два типа граничных условий: жесткие (когда крайним атомам расчетного блока не позволяется двигаться) и комбинированные свободно-жесткие (с наличием у бикристалла свободной поверхности).

Результаты и обсуждение

Для анализа влияния деформации на интенсивность диффузии по границам кручения (100) и (110) при использовании жестких условий определялись зависимости коэффициента диффузии от величины стартовой деформации. При этом проводились компьютерные эксперименты продолжительностью 200 пс при температуре 1500 К.

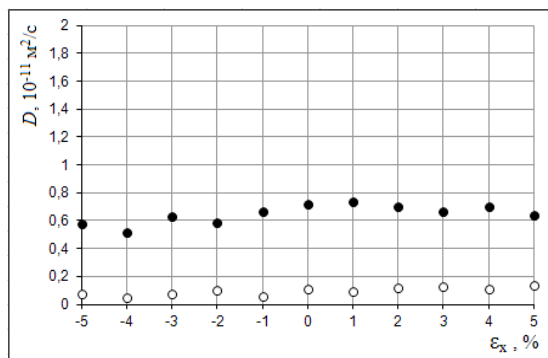
В большинстве случаев коэффициент самодиффузии увеличивался с ростом величины деформации, что является следствием увеличения свободного объема при растяжении. Исключением являлась зависимость коэффициента диффузии от деформации бикристалла с границами (100) вдоль оси X (перпендикулярно границе зерен). Как видно из

рис.2(а), коэффициент диффузии в этом случае почти не зависел от деформации, оставаясь постоянным в пределах погрешности измерений. Вместе с тем, при деформации вдоль оси Y (рис.2б), вдоль плоскости границы, наблюдалась явная зависимость интенсивности диффузии от деформации.

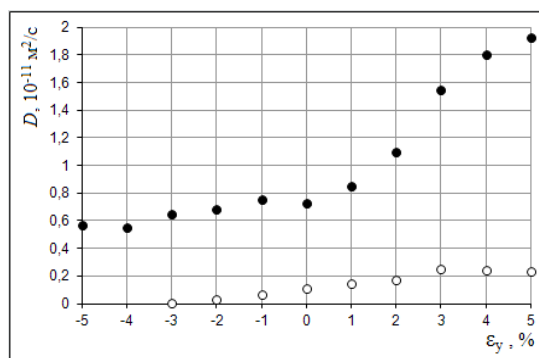
Наблюдаемое отличие влияния деформации вдоль осей X и Y на интенсивность диффузии по границам (100) можно объяснить тем, что при зернограницной диффузии по данным границам смещения атомов происходят преимущественно вдоль двух соседних плоскостей, параллельных границе. То есть смещения атомов в основном имеют

компоненты вдоль осей Y и Z, и значительно реже вдоль X. Следовательно, можно предположить, что на вероятность реализации подобных атомных смещений больше влияет избыточное свободное пространство, возникающее при деформации, в плоскости YZ.

Пластическая деформация в расчетных блоках с жесткими граничными условиями в основном заключалась в смещении ядер зернограницных дислокаций и связанными с этим смещениями атомов вдоль ядер (рис.3а), а также расщеплении зернограницных дислокаций и возникновении пластических сдвигов в зернах (рис.3б).

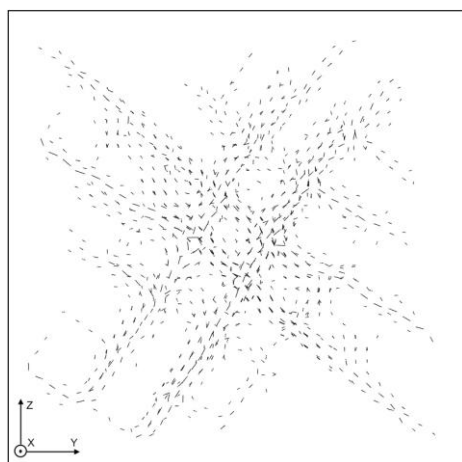


а)

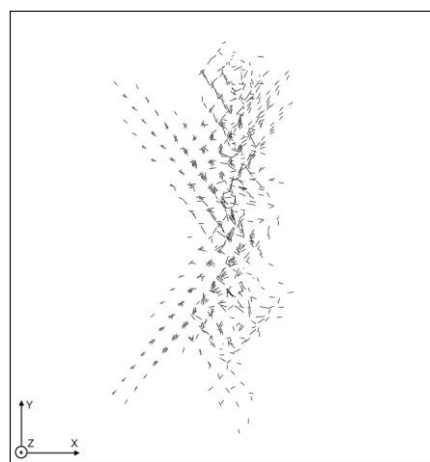


б)

Рисунок 2 - Зависимости коэффициента самодиффузии по границам кручения (100) с углами разориентации 15° (белые маркеры) и 24° (черные маркеры) от величины одноосной деформации вдоль осей X (а) и Y (б) в Ni.



а)



б)

Рисунок 3 - Примеры атомных смещений, возникающих при пластической деформации в бикристаллах с жесткими граничными условиями: а) смещения в плоскости границы (100) 15°, деформация 13% вдоль оси X, показаны атомные смещения больше 0,4Å; б) проекция смещений на плоскость XY, перпендикулярную плоскости границы, граница (110) 15°, деформация 7% вдоль оси X, показаны атомные смещения больше 0,6Å.

Наличие свободной поверхности в модели в значительной степени влияет на вероятность образования пластических сдвигов в расчетном блоке. Поэтому в настоящей работе было проведено исследование поведения бикристаллов Ni с границами кручения в условиях деформации не только с жесткими граничными условиями, но и при наличии у бикристаллов свободной поверхности.

На начальном этапе структурной релаксации деформированного вдоль оси X расчетного блока с комбинированными свободно-жесткими условиями возникали смещения атомов, начинающиеся от свободных поверхностей и направленные к центру расчетного блока при растяжении, при

сжатии, наоборот, от центра (рис.4а). В процессе компьютерного эксперимента они периодически усиливались и ослаблялись. При значениях стартовой деформации менее примерно 5-6% эти первоначальные смещения не приводили к образованию дополнительных дислокаций, однако провоцировали миграцию атомов вдоль зернограницных дислокаций (рис.4б). Заполнение избыточного свободного объема (при растяжении, при сжатии наоборот) происходило, таким образом, посредством образования цепочек смещенных атомов с поверхности в объем вдоль зернограницных дислокаций.

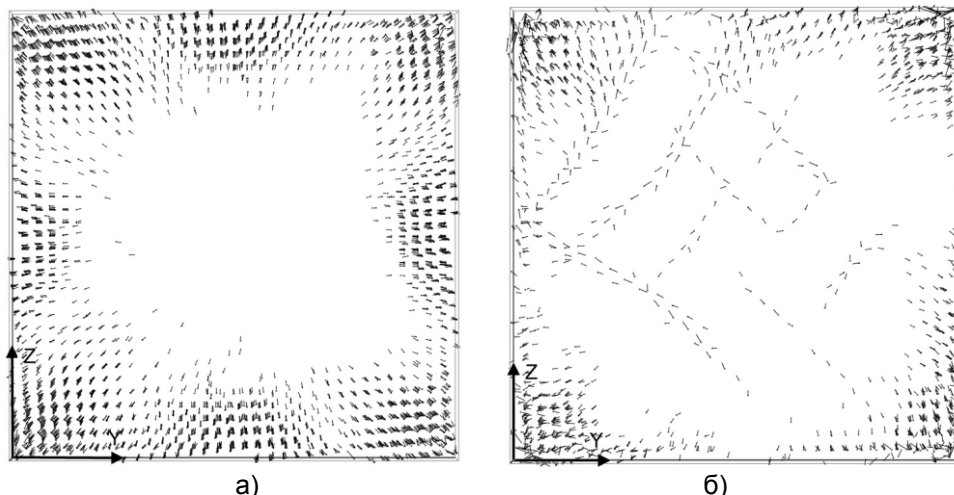


Рисунок 4 - Примеры атомных смещений (показаны смещения больше 0,6Å) в начале структурной релаксации (а) и спровоцированных первоначальными смещениями смещения атомов вдоль ядер зернограницных дислокаций (б) в расчетном блоке с границей кручения (100) 24° при стартовом растяжении вдоль оси X 4%.

Механизм атомных смещений, возникающих при структурной релаксации бикристаллов, деформированных вдоль Y, был аналогичен механизму при деформации вдоль X. Главное отличие заключалось в том, что смещения атомов вдоль ядер зернограницных дислокаций не провоцировались смещениями от свободных поверхностей, а во всех случаях возникали сразу наряду со смещениями атомов от поверхностей. Аналогичное поведение наблюдалось при деформации вдоль оси Y при жестких граничных условиях: диффузия интенсифицировалась при деформации дислокационной сетки. При деформации вдоль оси X (перпендикулярно плоскости границы) сетка винтовых дислокаций в границах (100) и (111) деформировалась слабо (в границах (110) сетка

деформировалась сильнее) и диффузия протекала почти также, как и в отсутствие деформации при жестких условиях или провоцировалась атомными смещениями от свободных поверхностей при свободно-жестких условиях.

Дислокации с поверхностями при свободно-жестких граничных условиях образовывались только при значениях стартовой деформации выше 5-6%. Как правило, пластический сдвиг инициировался на поверхности, а сама дислокация в большинстве случаев захватывалась зернограницной дислокационной сеткой.

Заключение

Таким образом, в результате исследования методом молекулярной динамики структурных превращений вблизи границ кручения было выяснено, что

растяжение бикристалла вдоль плоскости границы кручения приводит к интенсификации зернограницной диффузии, обусловленной трансформацией дислокационной сетки. При этом деформация в направлении перпендикулярном границе влияет на диффузию слабее. Пластическая деформация бикристалла на начальном этапе, как правило, сопровождалась образованием атомных смещений вдоль ядер зернограницных винтовых дислокаций, приводящих к трансформации дислокационной сетки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. М: Атомиздат, 1972. - 600 с.
2. Штремель М.А. Прочность сплавов. - Ч 1. - Дефекты решетки. - М.: Металлургия, 1982. - 280 с.
3. Полетаев Г.М., Мартынов А.Н., Старостенков М.Д. Структура и энергия границ зерен кручения в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2010. Т.7, №4. С. 27-34.
4. Мартынов А.Н., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Атомный механизм диффузии по малоугловым границам кручения в ГЦК металлах // Письма о материалах. 2011. Т.1, №1. С. 43-46.
5. Полетаев Г.М., Мартынов А.Н., Старостенков М.Д., Громов В.Е. Молекулярно-динамическое

исследование самодиффузии по границам зерен кручения в ГЦК металлах // Вестник ТГУ. Серия: Естественные и технические науки. 2011. Т.16, вып.3. С. 829-833.

6. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V.48, №1. P. 22-33.

7. Ларионов Л.Н., Исачев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. Киев: Наукова думка, 1987. - 511 с.

8. Смитлз К.Дж. Металлы: Справ. - М.: Металлургия, 1980. - 447 с.

Полетаев Г.М., д.ф.-м.н., профессор
кафедры ОФ,

e-mail: gmpoletaev@mail.ru

Дмитриенко Д.В., аспирант,

e-mail: gmpoletaev@mail.ru

Старостенков М.Д., д.ф.-м.н., профессор,
заведующий кафедрой ОФ,

e-mail: genphys@mail.ru

Семкин Б.В., д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой EuSA, руководитель центра обеспечения образовательной деятельности,

e-mail: genphys@mail.ru,

ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»