РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

РОССИЙСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ КОМИТЕТ ПО ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МЕХАНИКЕ

ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МЕХАНИКИ им. С.А. ХРИСТИАНОВИЧА СО РАН

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ ОМСКОЙ ОБЛАСТИ
ОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ И ПЛАСТИЧНОСТИ

Материалы XXIV Всероссийской конференции
(Омск, 2–4 июня 2015 г.)

Омск
Издательство ОмГТУ
2015

УДК 538.971

А.В. Корчуганов, e-mail: avkor@ispms.tsc.ru
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия
Томский государственный университет, г. Томск, Россия

ЗАРОЖДЕНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В УПРУГОДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛИТАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ

В рамках метода молекулярной динамики были исследованы зарождение и эволюция пластической деформации в упругодеформированных кристаллитах железа и ванадия при радиационном воздействии. В нагруженных образцах генерировались каскады атомных смещений. Показано, что радиационное воздействие может вызывать масштабные структурные перестройки вне радиационно-поврежденной зоны. Обнаружено, что они аналогичны перестройкам, возникающим при механическом нагружении образцов, в основе которых лежит механизм двойникования.

Ключевые слова – *радиационные дефекты, каскады атомных смещений, пластическая деформация, молекулярная динамика*

Введение

Разработка научных основ создания перспективных материалов для атомной энергетики требует детального изучения характера и особенностей структурных изменений в материалах на атомном уровне при механических, термических воздействиях и облучении. Это связано с тем фактом, что зарождение дефектной структуры, которое в последствие ведет к изменению эксплуатационных свойств, начинается на атомном уровне. Динамические нагрузки и высокие требования к пространственному разрешению не позволяют экспериментально отслеживать зарождение и эволюцию структурных изменений на микроуровне. Эти трудности могут быть преодолены при использовании методов компьютерного моделирования. При этом одним из наиболее эффективных подходов к решению задачи о динамике структурных трансформаций в материале на микроуровне при высокоэнергетических воздействиях является метод молекулярной динамики [1, 2].

Конструкционные материалы, используемые в атомной энергетике, наряду с радиационным облучением подвергаются термическому и механическому воздействию. Поэтому представляет интерес выяснить, насколько существенное влияние на радиационное поведение может оказать механическая нагрузка. Учитывая поликристаллическую структуру металлических материалов, можно предположить, что отдельные зерна металла находятся в стесненных условиях, которые влияют на особенности развития каскадов атомных смещений. Представляет интерес выяснить, при каких деформационных нагрузках радиационный отклик исследуемого металла начинает существенно отличаться от отклика ненагруженного материала. В соответствии с вышесказанным, в данной работе было проведено компьютерное моделирование поведения кристаллитов на атомном уровне при комплексном нагружении: механическом деформировании и радиационном облучении.

Исследуемая система

В качестве исследуемых материалов были выбраны железо и ванадий, сплавы на основе которых широко используются в атомной энергетике. Все расчеты проводились в рамках метода молекулярной динамики. Для описания межатомного взаимодействия в железе использовался парный центрально-симметричный потенциал [3], учитывающий вклад многочастичных взаимодействий в приближении газа валентных электронов. Межатомные взаимодействия в ванадии описывались многочастичным потенциалом [4], рассчитанным в приближении Финниса-Синклера. Выбранные потенциалы позволяют с хорошей точностью описывать упругие характеристики, энергии образования и миграции точечных дефектов, параметр решетки и т.д., что является важным условием для корректного моделирования процесса зарождения и эволюции пластической деформации, а также генерации и развития каскадов атомных смещений.

Моделируемые кристаллиты представляли собой параллелепипеды, ребра которых были ориентированы вдоль кубических направлений <100>. При расчетах использовались периодические граничные условия. Исходная температура моделируемых образцов составляла 100 К.

Результаты моделирования и обсуждение

Прежде чем моделировать поведение механически-нагруженного материала при радиационном воздействии представляется целесообразным изучить особенности зарождения и развития пластической деформации в исследуемом материале при механическом нагружении. Деформирование образцов проводилось таким образом, чтобы их объем оставался постоянным. Это соответствует поведению зерен в объеме материала в стесненных условиях при механическом нагружении. Нагружение кристаллитов проводилось следующим образом: в направлении [010] образец растягивался, а в двух других [100] и [001] – сжимался. Скорость растяжения составляла 0.01 м/с. Анализ структурных перестроек показывает, что при достижении порогового значения деформации в кристаллитах ванадия и железа начинают зарождаться и развиваться двойники. Отметим, что зарождение двойников в моделируемых кристаллитах согласуется с результатами экспериментов [5].

Исследование влияния механического нагружения на радиационный отклик кристаллитов проводилось для кристаллитов, деформированных упруго на различные величины. После деформации образцы выдерживались с целью релаксации структуры и затем в них генерировались каскады атомных смещений. Для каждой степени деформации кристаллитов подбиралось минимальное значение энергии каскада атомных смещений, которое вызывало не только генерацию пар Френкеля, но и масштабные (относительно размеров моделируемого кристаллита) структурные перестройки. Результаты расчетов показали, что чем выше степень деформации, тем меньше пороговое значение энергии первично-выбитого атома (ПВА), который вызывает структурные перестройки в кристаллите (рисунок 1).

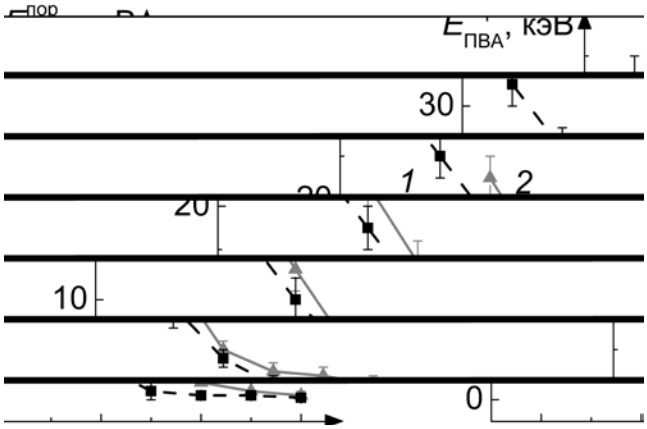
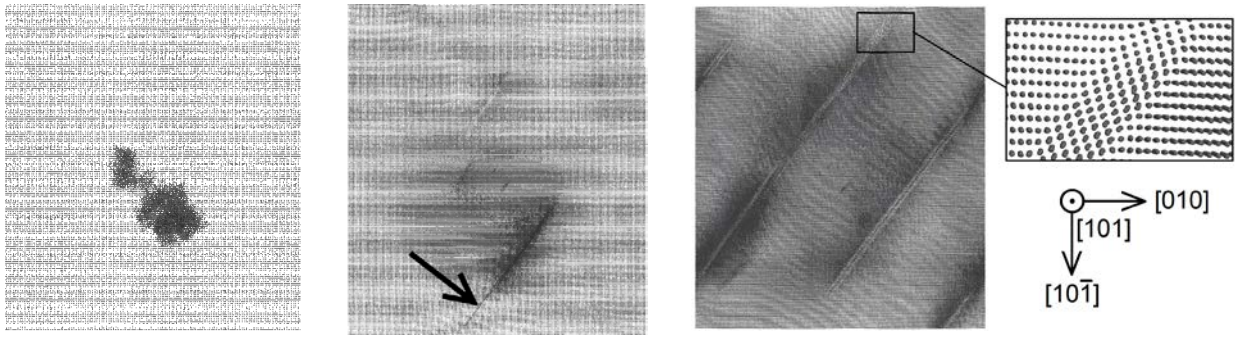


Рис. 1. Зависимость пороговой энергии ПВА, при которой каскад вызывает масштабные структурные перестройки, от степени деформации кристаллита.
Кривая 1 соответствует железу, кривая 2 – ванадию

Расчеты показывают, что структурные перестройки в кристаллитах, сформированные каскадами атомных смещений, аналогичны структурным перестройкам, вызванным механическим нагружением материала. В частности, на это указывает структура кристаллита железа в различные моменты эволюции каскада атомных смещений (рисунок 2). На баллистическом этапе развития каскада в образце формируются только пары Френкеля (рисунок 2а), затем на периферии радиационно-поврежденной зоны зарождаются двойникующие дислокации. Анализ структуры в различные моменты времени показал, что данные дислокации расположены в плоскостях типа {112} и перемещаются в направлениях <111>. След такой дислокации отмечен стрелкой на рисунке 2б. В последующем после аккомодации материала в кристаллите формируется двойник (рисунки 2в,г).



а) б) в) г)

Рис. 2. Проекция структуры растянутого на 5% кристаллита железа, на плоскость (101) в различные моменты времени после генерации каскада атомных смещений: а) 0.16 пс, б) 10 пс, в) 20 пс. Фрагмент структуры, содержащий двойник (г). Энергия ПВА – 25 кэВ

Заключение

Проведено изучение зарождения и эволюции пластической деформации в упругодеформированных кристаллитах железа и ванадия при генерации в них каскадов атомных смещений. Показано, что радиационное воздействие может приводить к образованию не только пар Френкеля, но и вызывать масштабные структурные перестройки вне радиационно-поврежденной зоны. При этом чем выше степень деформации моделируемого образца, тем меньше энергия каскада атомных смещений, который вызывает зарождение и развитие пластической деформации. Обнаружено, что структурные перестройки в кристаллитах, сформированные каскадами атомных смещений, аналогичны перестройкам, возникающим при механическом нагружении образцов, в основе которых лежит механизм двойникования.

Библиографический список

1. Psakhie, S. G., Zolnikov K.P., Kryzhevich, D.S. et al. Atomic collision cascades in vanadium crystallites with grain boundaries // Physical Mesomechanics. – 2009. – V. 12, I. 1 – 2. – P. 20–28.

2. Psakhie, S. G., Zolnikov K.P., Kryzhevich, D.S. et al. Evolution of atomic collision cascades in vanadium crystal with internal structure // Crystallography Reports. – 2009. – V. 54, I.6. – P. 1002–1010.

3. Романов, В. А. Кристаллографические, энергетические и кинетические свойства собственных точечных дефектов и их кластеров в ОЦК железе. 1. Полуэмпирическая модель ОЦК железа и потенциал межатомного взаимодействия / В. А. Романов // Вопросы атомной науки и техники. Серия. Машиностроение и Новые Материалы. – 2006. – В. 1 (66). – С. 129.

4. Sivak, A. B. et al. Energetic, kinetic and crystallographic characteristics of self-point defects in vanadium and iron crystals // Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA 2007), Monterey, California. – April 15 – 19. – 2007 – on CD-ROM.

5. G. T. (Rusty) Gray, High-strain-rate deformation: mechanical behavior and deformation substructures induced // Ann. Rev. Mater. Res. – V. 42. – 2012. – PP. 285–303.