ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/131

**АНАЛИЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИСЛОКАЦИЙ И ГРАНИЦ ЗЕРЕН В МЕДИ В
ЗАВИСИМОСТИ ОТ РАЗОРИЕНТИРОВОК И ТИПА ГРАНИЦЫ**

Давлятшин Р.П., Волегов П.С.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

Создание функциональных материалов, т.е. материалов с заранее известными физико-механическими свойствами, является важной задачей современного материаловедения. Такого рода материалы необходимы во всех отраслях промышленности, а их получение зачастую связано с необходимостью реализации интенсивных неупругих деформаций, которые, в конечном счете, реализуются за счет движения и взаимодействия различного рода дефектов (вакансий, дислокаций и т.д.). При этом промышленные материалы, как правило, представляют поликристаллические тела, т.е. состоят из зерен, по-разному ориентированных относительно друг друга. Это приводит к тому, что в процессе деформации дислокации вынуждены взаимодействовать с межзеренными границами, причем такое взаимодействие почти невозможно наблюдать в натурном эксперименте. Поэтому представляется актуальным использование различных техник прямого моделирования указанных процессов, в том числе – метода молекулярной динамики.

Метод молекулярной динамики состоит в представлении тела как совокупности взаимодействующих частиц. Сила межатомного взаимодействия определяется различного рода потенциалами. Наиболее эффективными для чистых металлов на данный момент являются потенциалы, основанные на методе погруженного атома (ЕАМ) [1]:

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{i,j(j \neq i)} \Phi(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i), \quad (1)$$

где $\Phi(r_{ij})$ – парный потенциал межатомного взаимодействия, r_{ij} – расстояние между атомами i и j , $F(\rho_i)$ – энергия погружения, а ρ_i – электронная плотность, действующая на атом i со стороны других атомов. В отличие от «классических», парных потенциалов, ЕАМ потенциалы учитывают взаимодействие электронных облаков с ядрами атомов. Однако не все потенциалы даже для одного металла одинаково хорошо воспроизводят его свойства [2]. В рамках работы необходимо было использовать потенциал, хорошо воспроизводящий дефектную структуру материала, в данном случае – меди. Для этого был проведен краткий обзор существующих ЕАМ потенциалов для меди и выбран наиболее пригодный для целей исследования [3].

Хорошо известно, что разориентировка и тип границы влияют на ее энергию [4], что необходимо учитывать при изучении взаимодействия дислокаций и границы зерен. Получение устойчивой межзеренной границы, вообще говоря, является отдельной задачей, результаты решения которой приведены, например, в [5]. В рамках работы для получения устойчивой межзеренной границы применяется метод имитации отжига, что существенно ускоряет вычислительный процесс и при этом не существенно влияет на конечную энергию границы.

Для изучения взаимодействия дислокаций и границ зерен предложена следующая математическая модель. В качестве «основы» был взят бикристалл с устойчивой межзеренной границей, состоящий из ~500000 атомов и имеющий периодические граничные условия по осям ОУ, ОZ и конечные граничные условия по оси ОХ. В один из кристаллитов вносилась петлевая дислокация. Такой вид дислокации был выбран для того, чтобы исключить возможность появления «бесконечной» дислокационной линии из-за использования периодических граничных условий (рис. 1). Далее было проведено моделирование процесса деформации простого сдвига бикристалла. Для этого в системе выделялись две «жесткие» области толщиной 6-7 межатомных расстояний, расположение друг напротив друга по оси ОХ. После чего атомам одной из этих областей была предписана постоянная скорость, соответствующая скорости деформации, а атомы другой области были жестко зафиксированы.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

Анализ взаимодействия дислокаций и границ зерен был проведен с применением алгоритма определения дислокаций (*dislocation extraction algorithm, DXA*), а также параметра центральной симметрии (*central symmetry parameter, CSP*).

Рис. 1. Визуализация дислокационной структуры (слева) и атомарной структуры (справа) бикристалла до процесса деформирования

В рамках работы предложена и реализована математическая модель, позволяющая изучать взаимодействие дислокаций и межзеренной границы. Проведены численные эксперименты деформации простого сдвига бикристалла с разными параметрами (разориентировка границы, размер бикристалла, длина решеточной дислокации, скорость деформации). Выявлено, что при увеличении размера бикристалла характер взаимодействия дислокации и границы зерен не меняется, в то время как разориентировка и скорость деформации существенно влияют на взаимодействие границ зерен, во многом из-за изменяющейся дислокационной структуры границы. Выявлены типы дислокационных структур, формирующихся вблизи границы, и их роль в процессе неупругой деформации. Исследован механизм неупругой деформации, связанный с выбрасыванием границей дислокационных петель, что позволяет говорить о границе как об активном источнике дислокаций.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ № МК-1298.2017.1.

Литература

1. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Physical Review B*. – 1984. – Vol. 29, No. 12. – pp. 6443-6453.
2. Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятшин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Часть 1: Потенциалы для однокомпонентных систем // *Вестник ПНИПУ. Механика*. – 2017. – № 4. – С. 214–237. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.14
3. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F., Kress J.D. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding and embedded atom method calculations // *Physical Review B*. – 2001. – V. 63, No. 22. – 224106. doi: 10.1103/PhysRevB.63.224106
4. Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах/под ред. Бернштейна М.Л., Новикова И.И. – Москва: Металлургия, 1980. – 153 с.
5. Volegov P.S., Gerasimov R.M. Modeling the formation of grain boundaries as a result of two-sided crystallization using molecular dynamics // *Key Engineering Materials*. – 2017. – V. 743. – pp. 181-186.