

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДИСЛОКАЦИЙ НА ДИНАМИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ УПРУГОСТИ КРИСТАЛЛОВ МЕДИ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ

Брюханов И.А.

*Институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва
ibryukhanov@gmail.com*

Аннотация. Исследуется влияние температуры и наличия дислокаций в кристаллах меди на структуру ударной волны и динамический предел упругости (HEL) методом молекулярной динамики. Показано, что в идеальных кристаллах меди [110] и [111] величина HEL слабо меняется по мере распространения волны. Значения HEL снижаются с температурой в идеальных кристаллах меди ориентации [110] и увеличиваются в [111] кристаллах. В кристаллах меди с дислокациями HEL затухает гораздо быстрее, чем в идеальных кристаллах, и увеличивается с температурой. Показано, что HEL затухает по степенному закону с показателем 0.5-0.7, что согласуется с экспериментальными данными для отожженной меди.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-71-00088.

Введение

Предел текучести определяет напряжение, выше которого материалы начинают необратимо пластически деформироваться. При умеренных скоростях деформации предел текучести большинства металлов уменьшается с повышением температуры. С увеличением скорости деформации становится все труднее осуществить деформацию образца. Эксперименты с ударными волнами позволяют достичь высоких скоростей деформации сжатия, превышающих 10^7 s^{-1} . Ударная волна распадается на упругий предвестник и следующую за ним пластическую волну. Динамический предел упругости (HEL) определяется напряжением на упругом предвестнике. Ударно-волновые эксперименты на многих отожженных гцк металлах с низкой плотностью дислокаций, таких как серебро [1], алюминий [2] и медь [3], показывают, что HEL может аномально увеличиваться с температурой.

Известная интерпретация этого эффекта связана с изменением механизмов движения дислокаций. При умеренных скоростях деформации дислокации движутся в термически активированном режиме, преодолевая барьеры кристаллической решетки, и поэтому их движение ускоряется с температурой. При более высоких скоростях деформации движение дислокаций переходит в режим фоновонного трения, коэффициент которого увеличивается с температурой, что приводит к замедлению дислокаций. Когда длина свободного пробега дислокаций достаточно велика, что характерно для отожженных металлов, то HEL может увеличиваться с температурой. Отметим, что увеличения HEL с температурой не наблюдается в не отожженных сплавах и оцк металлах, где либо относительно высокая плотность дислокаций, либо коэффициент фоновонного трения не сильно меняется с температурой. Даже небольшая пластическая деформация отожженных медных образцов сопровождается резким падением HEL при высокой температуре и исчезновением эффекта аномального термического упрочнения при высокой скорости деформации [4].

Монокристаллы меди [110] и [111] "в полученном виде" также демонстрируют аномальное увеличение HEL с ростом температуры [5]. Значение HEL для кристаллов меди очень мало в диапазоне температур от комнатной до 873 K, поэтому его невозможно точно измерить. Повышение температуры образца до 1273 K приводит к образованию пикообразной формы упругого предвестника и, следовательно, к увеличению значения HEL [5]. Появление резкого всплеска на фронте упругого предвестника с ростом температуры характерно для отожженных гцк металлов [2,3].

Целью данной работы является детальное изучение эволюции структуры ударной волны в кристаллах меди ориентации [110] и [111] и определение роли температуры и дислокаций. Строятся атомные модели кристаллов меди с дислокациями, и проводится моделирование их ударного нагружения. Впервые показано, что температурная зависимость в чистых кристаллах HEL сильно анизотропна, и HEL может возрастать с температурой в кристаллах ориентации [111] и убывать в кристаллах [110]. Установлено, что наличие дислокаций в кристалле приводит к замедлению затухания HEL с температурой.

Основной текст

Для создания дислокаций в кристалле меди использовался метод вырезания вакансионных дислокационных петель [6]. В четырех плоскостях (111) случайным образом вырезались ромбы толщиной в один атом с гранями, параллельными направлениям [112]. После чего производилась релаксация системы к заданной температуре и нулевому давлению. Рассматривался диапазон температур от 100 до 1100 K. В процессе релаксации к кристаллу прикладывалась деформация сдвига, при которой дислокации начинали двигаться и взаимодействовать друг с другом, образуя дислокационную сеть. После чего, сдвиговая нагрузка снималась. Модели идеальных кристаллов меди и кристаллов меди с дислокациями имели размер $460 \times 27 \times 27 \text{ нм}^3$. Для кристаллов меди [111] рассматривались более длинные модели $800 \times 20 \times 20 \text{ нм}^3$. Плотность дислокаций в моделях составляла примерно $2.2 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$. Распределение дислокаций в образцах было близким во всем

диапазоне температур от 100 до 1100 К.

Для моделирования ударного нагружения в кристаллах части атомов на левом краю образца присваивалась постоянная скорость. Для кристаллов меди с дислокациями и чистых кристаллов рассматривались диапазоны скорости удара 300–900 м/с и 700–1600 м/с, соответственно. Интегрирование атомов производилось в NVE ансамбле. Использовался потенциал EAM для меди [7]. Величина шага интегрирования 1 фс. Атомная скорость, плотность, температура и компоненты тензора напряжений усредняются по ячейке размером 1 нм вдоль направления распространения ударной волны. Процесс разбиения на ячейки осуществляется в деформированном состоянии. Вириал напряжения сначала рассчитывается без кинетической части. Вклад кинетической части $p k_B T$, где p - атомная плотность, добавляется к компонентам тензора напряжений, используя значения средней скорости частиц и температуры в ячейках. Положение дислокации определялось с использованием алгоритма DXA, реализованного в программном обеспечении OVITO [8]. Молекулярно-динамические расчеты проводились в пакете LAMMPS [9].

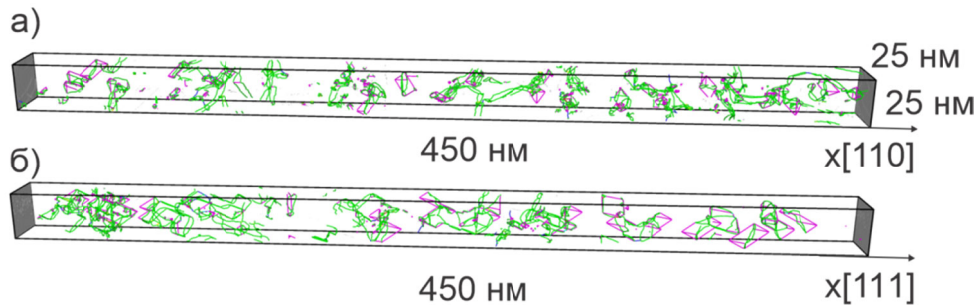


Рис. 1. Монокристаллы меди с дислокациями, ориентированные вдоль направлений (а) [110] и (б) [111]. Зеленые, синие и фиолетовые линии представляют частичные, полные и скрепляющие (stair-rod) сегменты дислокаций.

Зависимости напряжения на упругом предвестнике в кристаллах меди [110] и [111] показаны на рис. 2. Видно, что значения HEL снижаются с температурой для кристалла [110] при 900 м/с, что подтверждается шестью независимыми кривыми HEL в диапазоне температур от 100 до 1100 К. При других скоростях удара также наблюдалось аналогичное снижение HEL с температурой. Значения HEL для [110] кристаллов меди выше 900 м/с почти не зависят от скорости удара, и могут быть аппроксимированы линейной функцией температуры $42.7 - 21.4 \cdot T/T_m$, где $T_m = 1356$ К (рис. 2в).

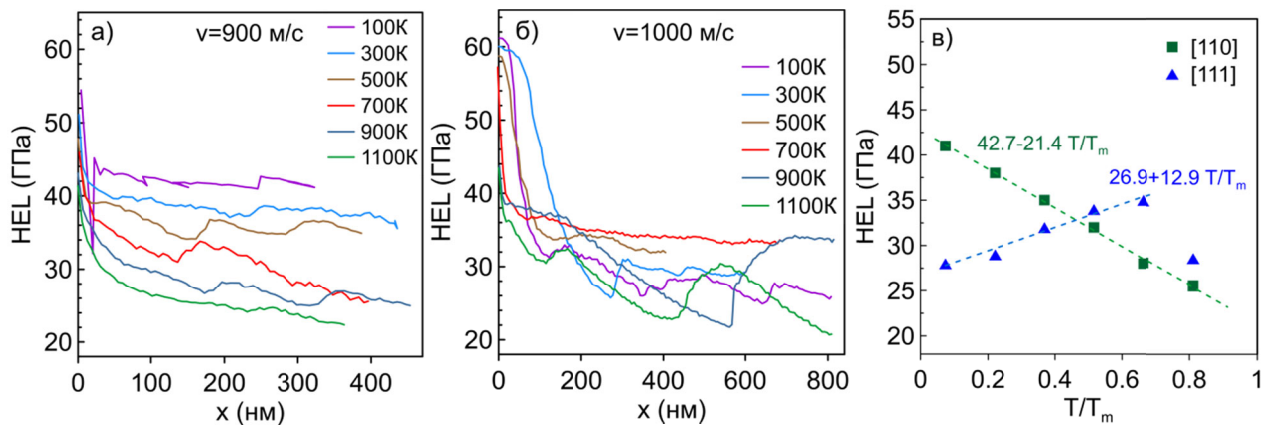


Рис. 2. Зависимости напряжения на упругом предвестнике от расстояния, пройденного ударной волной, в кристаллах ориентации (а) [110] и (б) [111] при скорости удара 900 и 1000 м/с. (с) Температурные зависимости HEL в кристаллах меди.

Из рис. 2б видно, что зависимости HEL для [111] чистых кристаллов длиной 0.8 микрон увеличиваются с температурой, по крайней мере, до температуры 900 К при 1000 м/с. Значение HEL увеличивается при 900 К, начиная с 580 нм, и превышает значение HEL при 700 К в конце расчета. Значения HEL при 1000 м/с также могут быть аппроксимированы линейной функции $26.85 + 12.88 \cdot T/T_m$, где $T_m = 1356$ К, для температур ниже 900 К. В этих линейных аппроксимациях значение HEL выбирается на пике осцилляций, до того, как значения начинают затухать при высоких температурах. Рис. 2в демонстрирует различное влияние температуры на значения HEL в кристаллах [110] и [111].

На рис. 3 показаны зависимости напряжения на упругом предвестнике в кристаллах меди с дислокациями при различных температурах. Видно, что значения HEL не достигают постоянного значения, как в случае идеальных кристаллов, и затухают во всем диапазоне расстояний распространения ударной волны. Значение HEL уменьшается в 2–4 раза, в зависимости от скорости удара, когда ударная волна распространяется на 450 нм. Несмотря на то, что начальные значения напряжения за фронтом волны уменьшаются с ростом температуры

при одной и той же скорости удара, по мере распространения волны значения HEL демонстрируют более выраженную обратную зависимость. Начало роста величины HEL с температурой наблюдается, когда ударная волна проходит около 100-120 нм, и этот рост более выражен в [111] кристаллах, чем в кристаллах ориентации [110].

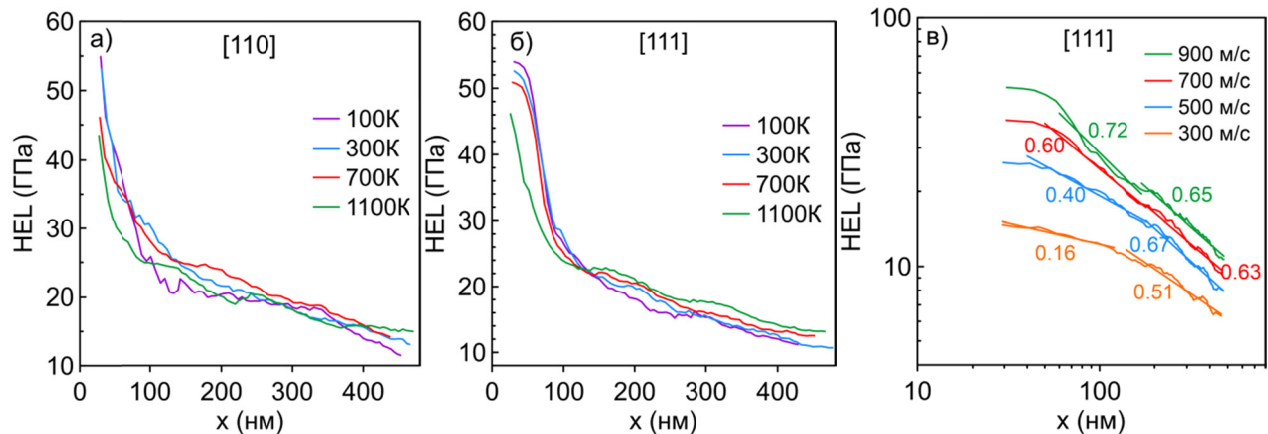


Рис. 3. Зависимости напряжения на упругом предвестнике от расстояния, пройденного ударной волной, в кристаллах ориентации (а) [110] и (б) [111] с дислокациями при скорости удара 900 м/с. (в) Затухание упругого предвестника в кристалле [111] при 300 К в логарифмической шкале. Цветами, соответствующими скоростям удара, отмечены показатели степени на каждом участке.

Затухание HEL имеет два участка, в каждом из которых может быть аппроксимировано степенной зависимостью (рис. 3в). На первом участке показатель степени сильно зависит от скорости удара. Например, для кристаллов меди ориентации [111] он увеличивается с 0.2 до 0.7 с ростом скорости удара от 300 до 900 м/с (рис. 3в). Этот результат ранее был известен из работы [6]. На втором участке показатель степени находится в диапазоне 0.5-0.7, не имея выраженной зависимости от скорости удара и температуры. Полученный диапазон степени затухания на второй стадии хорошо согласуется с экспериментальными значениями для отожженной меди, которые уменьшаются с 0.64 при 300 К до 0.58 при 1100 К [3].

Заключение

В работе показано несколько важных особенностей ударного сжатия идеальных кристаллов меди и кристаллов с дислокациями. При скоростях удара, близких к тем, при которых наблюдается зарождение дислокаций, ударная волна в идеальных кристаллах быстро приобретает форму, при которой значение HEL не меняется со временем. Значения HEL в идеальных кристаллах меди увеличиваются с ростом скорости удара, а в кристаллах [110] выходят на асимптоту при скоростях выше 700 м/с. Пластическая деформация за ударной волной в идеальных кристаллах меди сильно анизотропна, поэтому влияние температуры на величину HEL имеет разный знак вдоль ориентаций [110] и [111]. Значение HEL уменьшается с температурой для кристаллов [110] и увеличивается с температурой для кристаллов [111]. В кристаллах меди с дислокациями HEL затухает во всем диапазоне движения ударной волны. Наличие дислокаций приводит к более медленному затуханию HEL с температурой, и величина HEL увеличивается с температурой, когда волна проходит расстояние около 0.45 нм. Показано, что затухание HEL хорошо аппроксимируется степенной зависимостью с показателем степени 0.5-0.7, что согласуется с экспериментами на отожженной меди. Этот результат показывает близость механизмов пластической деформации за фронтом ударной волны в смоделированных кристаллах меди и экспериментах.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова и МСЦ РАН. Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №22-71-00088.

Литература

1. Zaretsky E.B., Kanel G.I. // J. Appl. Phys. 2011. Vol. 110, № 7. P. 073502.
2. Zaretsky E.B., Kanel G.I. // J. Appl. Phys. 2012. Vol. 112, № 7. P. 073504.
3. Zaretsky E.B., Kanel G.I. // J. Appl. Phys. 2013. Vol. 114, № 8. P. 083511.
4. Kanel G.I. et al. // J. Appl. Phys. 2020. Vol. 128, № 11. P. 115901.
5. Razorenov S. V., Savinykh A.S., Zaretsky E.B. // Tech. Phys. 2013. Vol. 58, № 10. P. 1437–1442.
6. Bryukhanov I.A. // Int. J. Plast. 2022. Vol. 151. P. 103171.
7. Mishin Y. et al. // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 63, № 22. P. 224106.
8. Stukowski A. // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. Vol. 18, № 1. P. 015012.
9. Plimpton S. // J. Comput. Phys. 1995. Vol. 117, № 1. P. 1–19.