

А. В. Маркидонов

Филиал Кузбасского государственного технического университета, г. Новокузнецк

т

н

а

О ВОЗМОЖНОСТИ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ, ВОЗНИКАЮЩИМИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ МАТЕРИАЛА

и

АННОТАЦИЯ

о

Методом молекулярной динамики проведено исследование динамики краевой дислокации в кристаллите никеля, подверженному воздействию ударной послекаскадной волны. Показано, что в результате данного воздействия дислокация смещается по направлению к источнику волны. Причиной данного движения является волна разгрузки, следующая за фронтом ударной волны.

т

и

т

ABSTRACT

т

Study of the dynamics of an edge dislocation in nickel crystals exposed to a post-cascade shock wave of, conducted by the method of molecular dynamics. It is shown that as a result of the impact of the dislocation moves towards the source of the wave. The reason for this movement is the discharge wave following the shock front.

проф., д-р техн. наук. *М. Д. Старостенков*

Keywords: nickel, dislocation, fields of tension, diffusion

В настоящее время одним из наиболее перспективных направлений современной технологии обработки материалов является использование ионных пучков. Физические свойства и структура материалов, подверженных ионно-лучевому воздействию, кардинально отличаются от соответствующих свойств и структуры, получаемых в результате термических или иных традиционных методов обработки. В связи с техническими сложностями и дороговизной процесса получения ионных пучков мощностью от нескольких десятков до несколько сотен МэВ в имплантационной металлургии при модификации свойств конструкционных материалов используются установки, позволяющие получать пучки ионов низких и средних энергий. Но для данных диапазонов энергий пробеги ускоренных ионов не превышают несколько сотен нанометров, что не достаточно для технологического применения. Данная проблема отчасти решается благодаря наличию определенных эффектов, которые в некоторых случаях многократно увеличивает глубину воздействия

падающих ионов на материал. Например, радиационно-стимулированные, термостимулированные, а также эффекты, возникающие в результате формирования в поверхностном слое облученного при высокодозной имплантации материала полей напряжений, приводят к увеличению глубины воздействия до нескольких десятков микрометров. Кроме этого, радиационно-динамические эффекты [1] могут инициировать структурно-фазовые превращения на миллиметровых глубинах при малых дозах облучения. Так, в работе [2] установлено, что изменение дислокационной и зеренной структуры алюминий-литиевого сплава в процессе облучения наблюдается по всему объему образца толщиной 1 мм. Эффект дального действия, наблюдающийся в данном случае, авторы объясняют радиационно-динамическим воздействием ударных послекаскадных волн, возникновение которых обусловлено различием между временем термализации атомных колебаний в некоторой конечной области и временем отвода из нее тепла. В результате резкого расширения такой сильно разогретой области и формируется почти сферическая ударная волна.

Известно, что наличие дислокаций определяет способность материала к пластической деформации, а их динамика лежит в основе многих важных физических свойств. Поэтому изучение на микроуровне воздействия ударных послекаскадных волн на дислокации и их динамику является вполне актуальной задачей, особенно если учитывать, что полного понимания эффекта дального действия на сегодняшний момент не существует. В связи с этим, целью настоящей работы является изучение динамики краевой дислокации в кристалле, подверженному воздействию ударной послекаскадной волны.

Исследование проводилось методом молекулярной динамики с помощью пакета МД-моделирования XMD [3]. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома.

Особенностями ударной послекаскадной волны, отличающей ее от волн, получаемых другими методами, является большая амплитуда атомных смещений, а также малая ширина фронта, соизмеримая с параметром решетки кристалла [4]. Поэтому для создания волны, группе атомов в приграничной области расчетного блока присваивалась скорость, превышающая скорость звуковых волн, вдоль кристаллографического направления $\langle 110 \rangle$. Плотнупакованное направление было выбрано потому, что из-за наличия механизмов фокусировки энергии, сферическая волна трансформируется во фрагменты плоских волн, распространяющихся именно вдоль плотнупакованных направлений. В результате последующих эстафетных атомных смещений формируется бегущая волна, ширина фронта которой не превышает нескольких межатомных расстояний, а амплитуда смещений атомов значительно превышает, например, амплитуду тепловых колебаний.

Рассмотрим расчетный блок, содержащий краевую дислокацию с

вектором Бюргерса $a/2\langle 110 \rangle$ и плоскостью скольжения $\{111\}$. В ГЦК решетке такая дислокация расщепляется на две энергетические более выгодные частичные дислокации. Для структурного анализа кристаллической матрицы, и выявления образующегося в данном случае дефекта упаковки, можно использовать методы, основанные на расчетах ближайшего окружения атома, в частности, метод параметра локальной центральной симметрии CS , характеризующего степень симметрии локального окружения каждого атома [5]. Проведенное исследование показало, что при генерации в расчетном блоке ударных волн наблюдается смещение расщепленной дислокации по направлению к источнику волн.

Известно, что движение дислокации определяется девиаторной компонентой тензора напряжений. Расчет напряжений при прохождении ударной волны и волны разгрузки показал следующее. Нормальное напряжение σ_x достигает максимума при прохождении через расчетную область фронта ударной волны, а касательное напряжение τ_x – при прохождении волны разгрузки. Релаксация касательных напряжений происходит в результате перемещения дислокации.

Проведенное исследование показало, что изменение дислокационной структуры облученного материала обусловлено не столько ударными послекаскадными волнами, сколько следующими за ними волнами разгрузки. Смещение дислокаций в кристалле приводит к изменению полей напряжений, что должно оказывать влияние на диффузию атомов, и, как следствие, может служить причиной радиационно-стимулированной диффузии.

Представленные положения могут найти применение при изучении проблем радиационного материаловедения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Овчинников В. В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // Успехи физических наук. 2008. Т.178. № 9. С. 991–1001.
2. Овчинников В. В., Ремнев Г. Е., Гусельников В. И., Гущина Н. В., Можаровский С. М., Филиппов В. А., Кайгородова Л. И. Иницируемые импульсными мощными ионными пучками изменения микроструктуры холоднодеформированного алюминий-литиевого сплава 1441 // Известия высших учебных заведений. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2010. № 2. С. 32–38.
3. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics // [Electronic resource]. Mode of Access: <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.
4. Zhukov V. P., Boldin A. A. Elastic-wave generation in the evolution of displacement peaks // Atomic Energy. 1987. V. 68. P. 884–889.
5. Kelchner C. L., Plimpton S. J., Hamilton J. C. Dislocation nucleation and defects structure during surface indentation // Physical Review B. 1998. V. 58. 11085.