

МОДЕЛИРОВАНИЕ СНИЖЕНИЯ РАДИАЦИОННОЙ ПОРИСТОСТИ МАТЕРИАЛА ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УДАРНЫХ ВОЛН

Липунов В.Н.¹, Маркидонов А.В.²

¹АлтГТУ им. И.И. Ползунова, Барнаул

²НФИ КемГУ, г. Новокузнецк

В данной статье приведены результаты компьютерного моделирования, выполненного по методу молекулярной динамики, в котором продемонстрированы изменения, происходящие в кристаллической структуре, содержащей пустоты сферической формы, при генерации ударной волны. Показано, что в данном случае наблюдается делокализация пустот, являющаяся откликом моделируемой структуры на внешнее высокоэнергетическое воздействие. Результаты моделирования могут быть применены в радиационном материаловедении в рамках разработки рекомендаций по снижению радиационного распухания.

Ключевые слова: кристалл, пора, объем, волна, модель, симуляция.

При внешнем высокоэнергетическом воздействии на твердое тело образуются структурные дефекты, роль которых высока в изменении различных физико-механических свойств. Последующая эволюция, например, точечных дефектов, концентрация которых превышает равновесную, заключатся в их коагуляции. В радиационном материаловедении известен эффект радиационного распухания, заключающийся в образовании в твердом теле пустот, способствующих увеличению объема [1]. Данный эффект является крайним нежелательным для любых конструкционных материалов, так как при этом увеличивается вероятность заклинивания отдельных деталей, выпячивания поверхностных узлов, перекоса конструкций и т.д. Одним из способов борьбы с распуханием является включение в материал различных примесей, снижающих порообразование, а также легирование, но немалый интерес могут представлять методы внешнего воздействия на материал, способствующие уменьшению пор.

Необходимо отметить, что воздействие на поверхность кристалла высокоэнергетическими частицами может приводить к образованию упругих волн, возникающих в локально перегретых областях [2]. Целью представленной работы является выявление атомных механизмов делокализации пустот в твердом теле под воздействием ударных волн с помощью метода молекулярной динамики. Возможность применения компьютерного моделирования для изучения подобных быстропротекающих процессов подтверждена рядом работ отечественных и зарубежных исследователей [3-7].

При проведении исследования компьютерная модель кристалла с порой строилась следующим образом. В прямоугольной системе координат

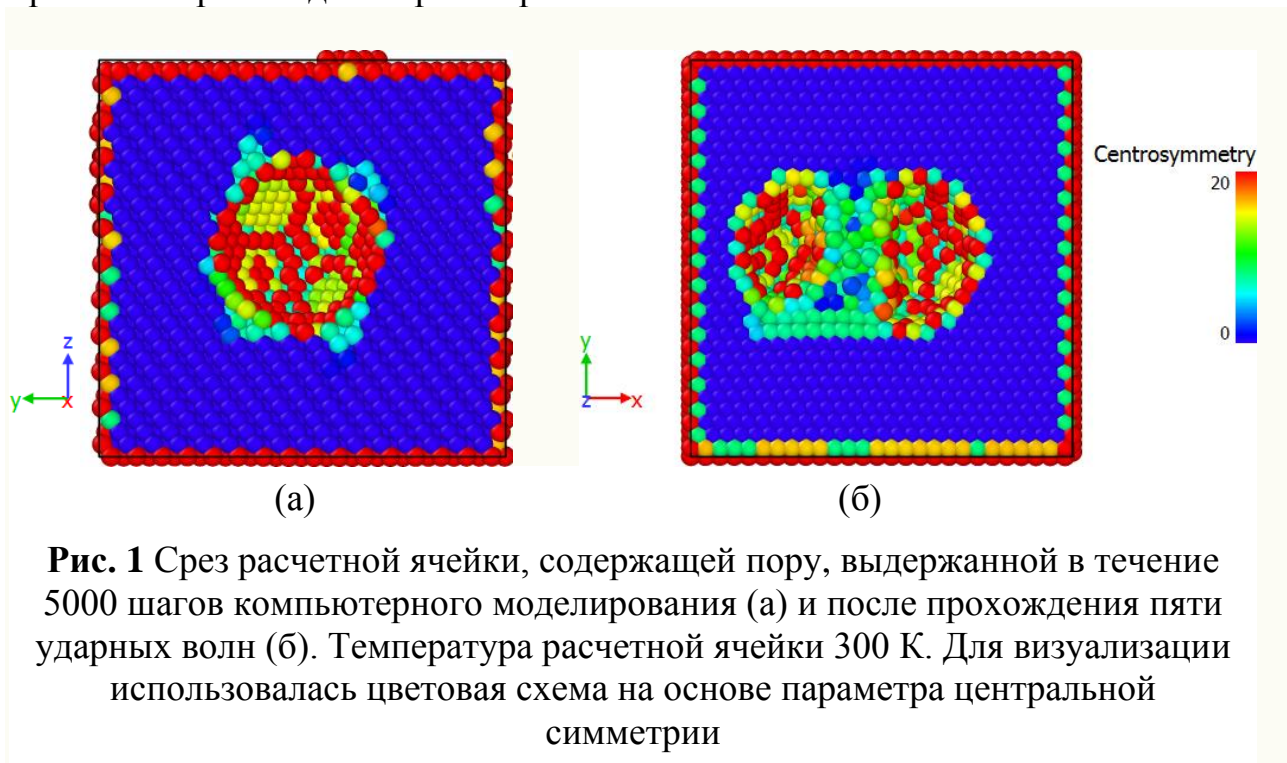
устанавливался размер расчетной ячейки, в форме параллелепипеда, по трем кристаллографическим направлениям, совпадающим с осями координат, являющимися взаимно ортогональными. Затем создавалась элементарная ячейка, в которой расположение частиц соответствовало ГЦК решетке, и с помощью трансляции данными ячейками заполнялся созданный объем. Параметр решетки у модели устанавливался равным 4.08 \AA , что соответствовало равновесному значению параметра для золота. Ориентация ячейки в пространстве задавалась по следующим образом: ось X совпадала с кристаллографическим направлением $\langle 1-10 \rangle$, ось Y – с кристаллографическим направлением $\langle 11-2 \rangle$, а Z – с направлением $\langle 111 \rangle$. Для того чтобы сымитировать бесконечную протяженность расчетной ячейки использовались периодические граничные условия вдоль всех трех осей. Далее выбирался узел в центре расчетной ячейки, который в дальнейшем будет являться центром создаваемой поры. После этого задавалась сфера некоторого радиуса, и удалялись все частицы, попавшие в выделенную область. После проведенного конструирования с помощью метода молекулярной динамики осуществлялась релаксация моделируемой системы, путем выполнения вычислительных шагов с обнулением скоростей атомов (имитация закалки), в результате чего система достигала локального минимума энергии, и полученная в результате данных манипуляций структура применялась для проведения последующих экспериментов.

Визуализация моделируемой структуры реализовывалась с помощью программы OVITO [8]. Для того чтобы выполнить структурный анализ моделируемой системы, и выявить структурные дефекты, можно использовать методы, базирующиеся на расчете ближайшего окружения каждого атома. К таким методам относится, например, метод параметра центральной симметрии, характеризующий степень симметрии локального окружения рассматриваемого атома [9].

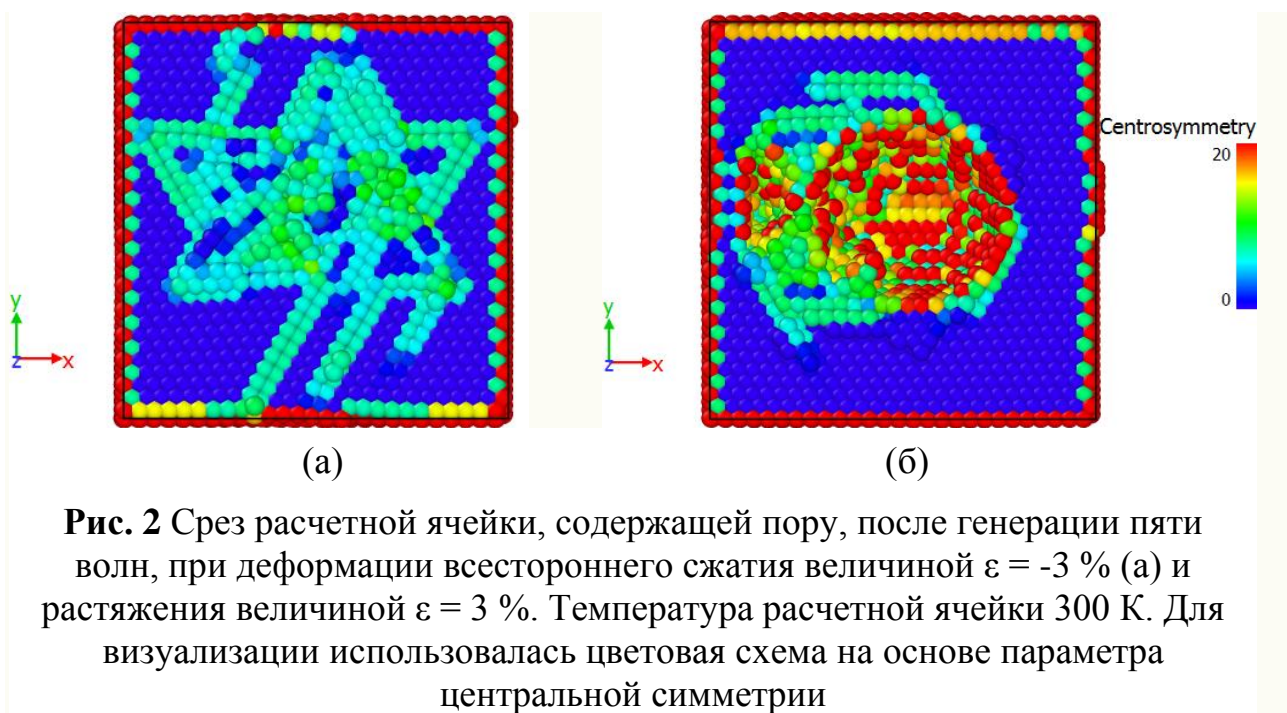
Для создания ударной волны применялась следующая методика. Выделялся слой граничных атомов расчетной ячейки толщиной в один атом. Выделенным атомам присваивалась скорость, вектор которой направлен вдоль плотноупакованного направления $\langle 1-10 \rangle$ и равен по модулю (в два раза превышающая скорость продольных упругих волн в золоте) для всех атомов. При выполнении исследования волны подобным образом создавались через каждые 500 вычислительных шагов. Моделировались случаи с разной температурой и различной величиной деформации.

Проведенное моделирование показало, что созданные в расчетной ячейке поры сохраняют сферическую форму при ее разогреве до 300 К и значительных структурных изменений не наблюдается. При 600 К в моделируемой расчетной ячейке начинают образовываться дислокации Ломер-Коттрелла, источником возникновения которых является поверхность поры. Кроме того, моделирование продемонстрировало, что ударные волны вызывают различные структурные изменения поры. Например, в случае температуры расчетной

ячейки 300 К пора под действием волны разделяется на две половины (рис. 1), а при 600 К происходит ее растворение.



При проведении исследования с расчетными ячейками, подверженными деформации, создаваемой путем изменения параметра решетки, выяснилось, что волн инициируют изменения в структуре тетраэдров дефектов упаковки, возникающих на месте изначально созданных пор. Кроме того, известно что растягивающие напряжения стабилизируют поры. Тем не менее, волны вызывают отщепление группы вакансий и смещают их по направлению к точке генерации волн (рис. 2).



Таким образом, проведенное исследование, выполненное методом молекулярной динамики, структурных трансформаций поры показало, что при разогреве расчетной ячейки пора способствует зарождение дислокаций Ломер-Коттрелла, а при дальнейшем нагреве наблюдается растворение поры. При сжатии расчетной ячейки происходит перестройка поры в два совмещенных тетраэдра дефекта упаковки. Волны, генерируемые в моделируемой области, в зависимости от условий проведения моделирования, способствуют разделению или растворению поры, а также отрыва от нее группы вакансий.

Список литературы

1. Мирзоев Ф.Х. Кинетика нуклеации кластеров и формирование наноструктур в конденсированных средах // Сборник трудов ИПЛИТ РАН «Современные лазерно-информационные и лазерные технологии». 2005. С. 62-78.
2. Калиниченко А.И., Стрельницкий В.Е. Упругие волны, возбуждаемые при ионной имплантации, и их влияние на процессы в облучаемом материале // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение». 2005. №5. С. 159-163.
3. Зольников К.П., Корчуганов А.В., Крыжевич Д.С., Чернов В.М., Псахье С.Г. Ударные волны в металлических кристаллитах при радиационном воздействии // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Термоядерный синтез». 2015. Т.38. Вып.2. С. 68-74.
4. Osetsky Yu.N., Victoria M., Serra A., Golubov S.I., Priego V. Computer simulation of vacancy and interstitial clusters in bcc and fcc metals // Journal of Nuclear Materials. 1997. Vol. 251. Pp. 34-48.
5. Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Нуркенова Б.Д., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Воздействие продольных волн на комплексы точечных дефектов в ГЦК кристалле // Известия Алтайского государственного университета. 2010. № 1/2 (65). Раздел Физика. С. 175-178.
6. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Tabakov P.Y. Splitting Vacancy Voids in the Grain Boundary Region by a Post-Cascade Shock Wave // Materials Physics and Mechanics. 2013. Vol.18. №2. P. 148-155.
7. Маркидонов А.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Роль высокоскоростных кооперативных атомных смещений в сверхглубоком проникновении вещества при радиационном облучении материала // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т.9. №2. С. 201-207.
8. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. Vol.18. 015012 (7pp).
9. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // Physical Review B. 1998. Vol.58. No.17. Pp. 11085-11088.