

На правах рукописи

ДРОЗДОВ Александр Юрьевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ РАЗВИТИЯ
НАНОДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛАХ ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ И
ДЕФОРМАЦИИ**

Специальность 01.04.01. – Приборы и методы экспериментальной физики

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Ижевск 2007

Работа выполнена в лаборатории электронной структуры поверхности Физико-технического института Уральского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель: доктор технических наук,
профессор **Баянкин Владимир Яковлевич**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор **Вахрушев Александр Васильевич**
доктор физико-математических наук,
профессор **Марценюк Михаил Андреевич**

Ведущая организация: ГОУ ВПО Вологодский государственный
технический университет, г. Вологда

Защита диссертации состоится 14 ноября 2007 г. в 12⁰⁰ часов на заседании Диссертационного совета Д 212.275.03 при Удмуртском государственном университете по адресу: 426034, г. Ижевск, ул. Университетская, д.1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке УдГУ.

Автореферат разослан ___ октября 2007 г.

Ученый секретарь диссертационного совета

Д 212.275.03 УдГУ

кандидат физико-математических наук,
доцент

Крылов П.Н.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность. В связи с повышенным вниманием к нанокристаллам, как материалам высоких технологий, изучение их структуры, фазовых превращений, механических свойств является ключевой задачей прогнозирования их эксплуатационных характеристик и функциональных свойств.

Прочность является одним из важнейших функциональных свойств конструкционных материалов, среди которых металлы и сплавы остаются и сегодня наиболее распространенными. Физическая природа разрушения твердых тел кроется в обстоятельствах разрыва атомных связей под действием локальных напряжений и термических флуктуаций. Конкретизировать эти обстоятельства можно, если рассмотреть проблему на атомарном уровне. К сожалению, экспериментально это сделать не всегда возможно. Многообразие возможных схем взаимодействия точечных, линейных и объемных дефектов между собой и с элементами исходной структуры материалов (такими как выделения и включения другой фазы, границы зерен и т.д.) затрудняют возможность экспериментально исследовать все ситуации, реализуемые на практике.

Наряду с традиционными методами физического эксперимента в последние годы все большее внимание уделяется методам компьютерного моделирования. Применение методов компьютерного эксперимента, актуальность которых на сегодняшний день значительно возросла, необходимо, поскольку обеспечивает рассмотрение процессов на наноразмерном уровне и позволяет получать результаты, которые невозможно на сегодняшний день получить экспериментально.

Механизмы деформации и разрушения металлов на атомарном уровне прямыми экспериментальными методами изучать чрезвычайно сложно – методов не так много (например, высоковольтная электронная микроскопия) и они требуют дорогостоящего оборудования. Например, при изучении механизмов развития микротрещин в металлах при внешних воздействиях (в том числе при ионной имплантации) существенно понимание характера атомных перестроек непосредственно в устье трещины и достичь его возможно только совместным использованием методов натурального эксперимента и компьютерного моделирования.

Исследования, связанные с воздействием ионной имплантации на поверхность металлов широко проводятся уже несколько десятилетий, и кроме фундаментальных задач в центре внимания находятся вопросы направленной модификации механических характеристик и разработка новых материалов с заданным комплексом свойств.

В настоящее время методами молекулярной динамики достаточно успешно моделируют прочностные характеристики металлов и сплавов, а также поведение

материалов при воздействии какого-либо внешнего фактора. Однако, реальные материалы подвергаются воздействию целого комплекса факторов, поэтому естественным продолжением подобных работ является разделение и комбинирование факторов внешнего воздействия на исследуемый материал – будь то деформация, нагрев, ионная имплантация и др.

Но, несмотря на интенсивные исследования, получившие отражение в многочисленных обзорах, монографиях и статьях, атомные механизмы разрушения, эволюция структурных дефектов, поведение микронесплошностей при ионной имплантации до сих пор остаются до конца не ясными и полностью не изученными. В то же время огромный научный и прикладной интерес к нанокристаллическим материалам подталкивает исследователей к применению методов компьютерного эксперимента для выяснения закономерностей таких процессов.

В связи с вышеизложенным **цель работы** состояла в следующем:

Исследование микроскопических механизмов поверхностного упрочнения металлов при ионном облучении и динамики поведения нанодефектов при деформации.

В соответствии с поставленной целью в работе решались следующие **задачи**:

1. Проведение компьютерных экспериментов по изучению динамики развития приповерхностных дефектов (нанопоры, нанотрещины) в модельных ОЦК-, ГЦК-, ГПУ-металлах в условиях одноосного растяжения при ионной имплантации;
2. Проведение компьютерных экспериментов по изучению динамики развития приповерхностных дефектов в условиях деформации;
3. Проведение сравнительного анализа механизмов распространения нанотрещины в имплантированных и неимплантированных образцах при одноосном растяжении;
4. Сравнение с натурными экспериментами по исследованию поверхности после ионной имплантации в металлах (метод туннельной сканирующей микроскопии, высоковольтной электронной микроскопии);

Научная новизна работы.

1. Впервые методом молекулярной динамики проведен сравнительный анализ распространения микротрещины на атомном уровне в кристаллах с ОЦК-, ГЦК- и ГПУ типом решетки при деформации растяжением до и после ионного облучения.

2. Проведены исследования атомной структуры, ближнего порядка, позволившие проследить за перестройкой атомов в устье нанотрещины и вблизи нанопоры при ионной имплантации.
3. Предложен микромеханизм процесса упрочнения приповерхностных слоев металлов после ионного облучения.

Научная и практическая значимость работы.

Показано, что использование метода молекулярной динамики в сочетании с экспериментальными методами позволяет на атомном уровне изучать динамику распространения нанотрещины непосредственно при деформации и облучении мишени. Предложенные закономерности развития нанотрещины в кристаллах с различным типом кристаллической решетки позволяют воздействовать на начальную стадию процесса разрушения металлических изделий, что может быть использовано при разработке технологий их получения и применения. Полученные данные могут быть использованы при разработке технологии получения нанокристаллических материалов с заданными прочностными характеристиками.

Основные положения, выносимые на защиту.

Проведен сравнительный анализ поведения нанотрещины в чистых металлах с ОЦК, ГЦК и ГПУ типом решетки и обнаружены различия в поведении металлов, зависящие от типа кристаллической структуры.

- Показано, что чистые (без примеси) металлы при одноосном растяжении после ионного облучения не охрупчиваются, характер распространения нанотрещины вязкий.
- Выявлено, что механизмы и степень залечивания нанотрещины в процессе ионного облучения в металлах в первую очередь зависят от типа кристаллической решетки. Увеличение прочности кристаллита наблюдается для всех облученных образцов.
- В чистом α -Fe (ОЦК-решетка) залечивание происходит за счет перемещения отдельных фрагментов атомного ряда из приповерхностных слоев к устью нанотрещины, что приводит в итоге к появлению на месте бывшей трещины кристаллической области обогащенной вакансиями.
- Показано, что алюминий и никель (ГЦК-решетка) при одноосном растяжении после ионного облучения проявляют пластичность, образуя дислокации и двойники.
- Показано, что в чистом (беспримесном) титане (ГПУ-решетка) распространение нанотрещин после ионного облучения не происходит. Устье

трещины после ионного облучения залечивается, происходит трансформация нанотрещины в нанопору, что приводит к увеличению прочности кристаллита.

- Увеличение концентрации водорода вблизи устья трещины в железе инициирует тенденцию к протеканию фазового $\alpha \rightarrow \gamma$ перехода. В результате этого наблюдается распространение трещины, то есть охрупчивание материала.

Апробация работы. Основные материалы диссертации докладывались и обсуждались на:

- IV-VII Всероссийский семинар "Физические и физико-химические основы ионной имплантации" (г. Н.Новгород, 1998, 2000, 2002, 2004г.);
- 6-7th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows (Tomsk, Russia, 2002, 25-29 July 2004);
- V-VII Международный уральский семинар "Радиационная физика металлов и сплавов" (г. Снежинск, 2003, 2005, 2007 г.г.);
- 41 Международная конференция "Актуальные проблемы прочности" (г. Калуга, 2004г.);
- IV-VII Межгосударственных семинарах "Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий" (г. Обнинск, 1999, 2001, 2003, 2005г.);
- Конференция молодых ученых ФТИ УрО РАН, (г. Ижевск, 2001, 2002, 2003, 2004г.);
- XLIV Международная конференция "Актуальные проблемы прочности" (г. Вологда, 2005г.);

Публикации. По теме диссертации опубликовано 20 печатных работ, из них 4 статьи в рецензируемых журналах.

Работа выполнена в лаборатории электронной структуры поверхности Физико-технического института УрО РАН в рамках темы научно-исследовательских работ по теме: «Исследование сегрегационных процессов в поверхностных слоях сплавов на основе 3d - металлов после внешних (термических, механических, ионно-лучевых) воздействий» (№ гос. регистрации 01.2.00305815) и проектов РФФИ № 02-02-16670, 03-02-06526 «Исследование сегрегационных процессов в поверхностных слоях металлических систем при ионной имплантации».

Личный вклад автора. Диссертация является самостоятельной работой, обобщившей результаты, полученные автором лично, а так же в соавторстве. Автором диссертации совместно с соавторами проведено экспериментальное изучение влияния ионной имплантации на усталостную прочность титанового сплава методом атомной силовой микроскопии. Была проведена работа по модификации

программного пакета MMD2.0 для применения к изучению процессов, сопутствующих ионному облучению.

В работе использовались результаты, полученные Чудиновым В.Г. (программный пакет MMD2.0), Барановым М.А. (расчет параметров потенциалов), Быстровым С.Г., Жихаревым А.В. (атомно-силовая микроскопия).

Цель работы и конкретные задачи экспериментальных исследований сформулированы научным руководителем Баянкиным В.Я. и Барановым М.А. Обсуждение и интерпретация результатов компьютерных экспериментов проводилась совместно с научным руководителем и соавторами публикаций. Основные положения и выводы диссертационной работы сформулированы автором.

Структура и объем диссертации. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Содержание диссертации изложено на 160 страницах машинописного текста, включая 54 рисунка и библиографический список, содержащий 151 название.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении отмечается актуальность темы, определена цель работы, сформулированы задачи, решаемые в диссертации. Выделены основные результаты, показана их научная новизна, научная и практическая ценность, приводятся основные положения, защищаемые в работе, излагается структура диссертации.

Первая глава содержит обзор отечественной и зарубежной литературы, посвященный теоретическим и экспериментальным исследованиям, а также моделированию на компьютере эволюции нанодефектов в металлах при внешних воздействиях. Основное внимание уделяется современным представлениям о природе разрушения металлов и физическим моделям, в которых разрушение рассматривается как кинетический процесс зарождения, роста и объединения микронесплошностей. В главе рассмотрены работы по влиянию ионного облучения на прочность металлов.

Из проведенного анализа литературы видно, что для выявления особенностей процесса разрушения металлических материалов на атомном уровне при ионном облучении необходимо использование в комплексе методов натурального эксперимента и компьютерного моделирования. При таком подходе к изучению начальной стадии эволюции дефектов с наноразмерами удастся объяснить различное поведение металлов при деформации и влияние примесей на разрушение.

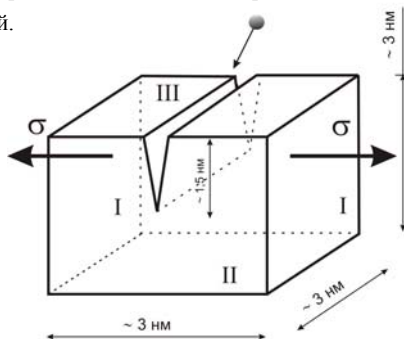
Вторая глава является методической и посвящена описанию методов компьютерных исследований процессов деформации, разрушения и ионного облучения. Основным методом моделирования в данной работе является метод молекулярной динамики (МД). Для учета особенностей развития каскадов

столкновений при различной энергии падающих ионов использовались метод Монте-Карло, а также с помощью компьютерных расчетов находилось приближенное решение интегро-дифференциальных уравнений.

Рис. 1. Схема компьютерного эксперимента по одноосному растяжению и ионному облучению кристаллита

На грани I и II накладываются циклические граничные условия

На грани III накладываются свободные граничные условия



Суть метода МД состоит в моделировании фазовой траектории системы путем интегрирования уравнений движения достаточно большого числа частиц с заданным законом взаимодействия. В результате чего находятся динамические траектории частиц, затем с помощью эргодической гипотезы гиббсовские средние от любых динамических переменных. В настоящее время для систем с числом атомов $N \sim 10^3$ и больше используется аппарат классической механики. Такой выбор обусловлен малостью длины волны де-Бройля атома по сравнению с характерным межатомным расстоянием. Кроме того, используется адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера, которое позволяет рассматривать электронную подсистему независимо от ядерной системы. Знание траектории каждой частицы в модели объекта – это исчерпывающая информация, которую невозможно получить ни в каком эксперименте с реальным веществом. Поэтому метод МД в принципе позволяет рассчитать любое свойство системы, как термодинамическое, так и кинетическое.

Для решения уравнений движения требуется информация о межатомных взаимодействиях, которые в общем случае зависят от расположения нескольких ближайших соседей в окружении атома. Однако сложные эффекты, связанные с этим, можно учесть, используя парные эффективные полуэмпирические потенциалы. Основным недостатком метода является то, что в нем нельзя корректно учесть влияние объемных сил, обусловленных свободными электронами, из-за использования классических, а не квантовых уравнений движения. Поэтому основная задача – воспроизведение атомных механизмов процесса на качественном уровне.

Модельный кристаллит. Формирование кристаллита включает следующие этапы:

- 1) трансляция атомов в ячейке, для создания кристаллической решетки с заданной симметрией, например объемно-центрированной решетки железа (α -Fe);
- 2) задание потенциалов взаимодействия;
- 3) минимизацию энергии (подбор размера ячейки с минимальной энергией);
- 4) задание начальных расчетных условий (задается начальная температура, формируется дефектная структура, например, микропора или микротрещина);
- 5) достижение равновесного состояния кристаллита для данной температуры без внешнего воздействия на систему (порядка 10^4 шагов что соответствует $\approx 10^{-12}$ сек)

Дальше, в зависимости от задачи, кристаллит можно деформировать, облучать ионами, разогревать или охлаждать и т.д. (Рис.1.)

Для модельного кристаллита можно получить следующую информацию:

1. Функции радиального распределения атомов (для всех сразу или парциальные для каждого сорта атомов).
2. Функции распределения атомов по скоростям (также, для всех сразу или парциальные для каждого сорта атомов).
3. Зависимость кинетической, потенциальной и полной энергии от времени/шага.
4. Зависимость минимального расстояния и максимальной скорости атомов от времени/шага.
5. Автокорреляционные функции скоростей (для всех атомов сразу или парциальные для каждого сорта атомов).
6. Плотность колебательных состояний.
7. Для любого атома - его координаты и скорость.
8. Графическое отображение любых плоскостей в кристаллите, в том числе в динамике.

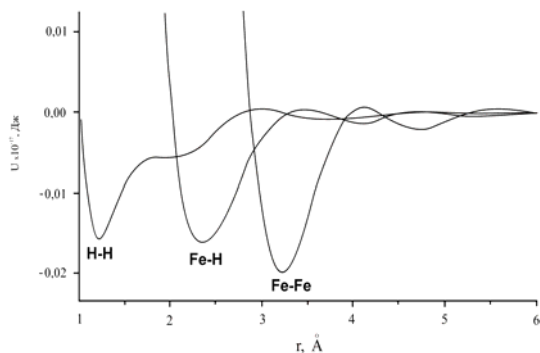


Рис. 2. Потенциалы парного взаимодействия в системе железо с примесью водорода.

Основной трудностью при компьютерном моделировании различных систем является отсутствие сведений о потенциалах парного взаимодействия (ППВ). Для металлических систем эти потенциалы наиболее корректно можно рассчитывать в рамках теории псевдопотенциала [1]. Специфика металлов заключается в том, что необходимо учитывать две подсистемы: ионную и электронную. Поэтому она построена в рамках квантово-механического подхода. В ее основе лежит замена истинного потенциала электрон-ионного взаимодействия на слабый псевдопотенциал и использование теории возмущения для описания электронной подсистемы. Теорию псевдопотенциала выгодно отличает от большинства методов применимость не только к идеальным, но и к неупорядоченным структурам. Как было показано в работе [108] в ряде случаев наилучшим является представление ППВ в виде Хейне-Абаренкова-Анималу (ХАА) с обменно-корреляционной функцией Шуу. Используя в качестве априорной информации спектроскопические термы атомов и плотность электронов удалось рассчитать [2] основные свойства металлов (электропроводность, энергию связи, сжимаемость, фононный спектр, теплоемкость, коэффициенты теплового расширения и т.д.) в твердом и жидком состоянии. Все свойства описывались с точностью ~10-15% для s, p-металлов и ~30% для d-металлов. Кроме того, как было показано в работах В.Г.Чудинова эти ППВ обеспечивают устойчивость соответствующих кристаллических решеток, как для чистых элементов, так и для сплавов [3]. Рассчитанные по этой методике потенциалы (рис.2.) использовались в нашей работе при проведении компьютерных экспериментов по ионному облучению и растяжению кристаллита, содержащего микроскопические несплошности (нанопору, нанотрещину).

Метод МД во многих случаях оказывается более точным и производительным, чем прямой эксперимент, а при изучении разрушения металлов при внешних воздействиях его применение обусловлено получением информации о механизмах процессов на наноразмерном уровне для построения надежной физической модели разрушения.

В третьей главе изложены результаты компьютерных экспериментов по изучению поведения нанопоры в чистых ОЦК и ГЦК металлах и с примесью водорода при одноосном растяжении и ионном облучении.

В каждой серии компьютерных экспериментов кинетическая энергия атомов кристаллита в начальной конфигурации соответствовала температуре 300 К. Параметр решетки определялся из условия минимума потенциальной энергии кристаллита. Шаг по времени $\tau = 2 \cdot 10^{-15}$ сек. Фактически моделирование одноосного растяжения состояло из четырех этапов, характеризующихся относительным удлинением образца: 12,5%; 25%; 37,5%; 50%.

Потенциальная энергия системы после первого и второго этапа растяжения больше, чем до него. Результаты моделирования ОЦК-железа дают основание предполагать, что на первых двух стадиях наблюдается упругая деформация, при которой не происходит необратимой перестройки атомной структуры пленки. Это предположение подтверждается непосредственными наблюдениями за поведением атомов и тем, что на этой стадии не происходит генерация дислокаций. Изучение движения отдельных атомов на разных этапах проведения компьютерного эксперимента позволило выделить особенности структурных перестроек материала в процессе деформирования.

На рис.3 приведены несколько соседних плоскостей типа (001) при удлинении кристаллита на 25%. Из представленных рисунков видно, что увеличение длины кристаллита произошло за счет двух механизмов: удлинение элементарной ячейки первоначального образца и возникновение дислокационных дефектов.

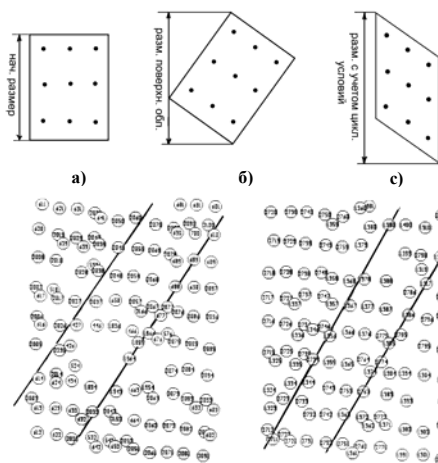


Рис. 3. Изменение размеров элементарной ячейки в модельном кристаллите при растяжении

Кроме того, толщина исследуемой пленки после растяжения на 25% уменьшилась приблизительно на 8%, что свидетельствует об изменении размера элементарной ячейки в направлении $[001]$. Подобная трансформация привела к изменению вида функции радиального распределения атомов. Аномально большая неупругая деформация (при относительном удлинении 25%) объясняется, по-видимому, бездефектной и беспримесной структурой образца, чего практически никогда не случается при натуральных экспериментах. Следует выделить тот факт, что на данном этапе моделирования нанопора не изменила свою форму и сохранила первоначальные размеры.

После растяжения кристаллита с нанопорой на 37,5% поведение системы кардинально изменилось. После фазы “быстрой” релаксации (изменение размеров элементарной ячейки, появление дислокационных дефектов) на графиках зависимости потенциальной энергии от времени отсутствует фаза затухающих

колебаний. Вместо этого наблюдается фаза “медленной” релаксации с характерным временем $\tau \sim 10^{-11}$ сек. Одним из результатов возникновения медленной фазы является уменьшение потенциальной энергии системы до значения меньшего, чем было до третьего растяжения. На этой стадии начинается пластическая деформация кристаллита. Во время этой фазы происходит переход энергии, накопленной в результате упругой деформации, в необратимую перестройку структуры образца, которую мы непосредственно наблюдаем при анализе расположения атомов по атомным плоскостям кристаллита.

Толщина пленки в направлении [001] при растяжении на 37,5% уменьшилась на 25%. Удивительным также является тот факт, что число слоев в направлении растяжения также уменьшилось. Объяснить такое поведение можно перестройкой атомов при залечивании нанопоры. При относительном удлинении кристаллита 50% деформация пластическая, в беспримесном кристаллите происходит полное залечивание нанопоры.

При моделировании теплового пика (чистое железо с ОЦК-решеткой), считалось, что вся энергия первично - выбитого атома (ПВА) с энергией 100 эВ передается атомам внутри сферы, окружающим нанопору. Такое распределение энергии соответствует случаю облучения мишени тяжелыми ионами (масса иона больше массы атома мишени). Для того, чтобы время жизни теплового пика соответствовало литературным данным [4], от атомов на границах кристаллита через равные промежутки времени отводится кинетическая энергия, моделируется влияние бесконечного кристалла. Анализируя перемещение атомов как в области теплового пика, так и вокруг нее можно выделить три механизма потерь энергии: первый механизм - это распространение упругих волн к поверхности пленки (в направлении [001]); второй - пластическая деформация в области теплового пика за счет напряжений, возникающих при локальном плавлении; третий - цепочки атомных соударений. Это подтверждают графики зависимости кинетической, потенциальной и полной энергии кристаллита от времени.

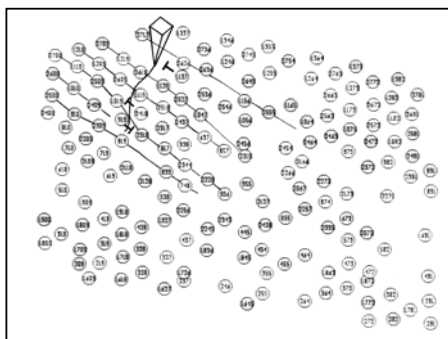
Изучение дефектов структуры модельного кристаллита и поведения отдельных атомов позволяет определить усредненное влияние непрерывного облучения на устойчивость поры. Было замечено, что размеры поры после облучения уменьшились, произошло частичное заполнение поры атомами из близлежащих слоев, но полного залечивания нанопоры за время моделирования $\tau \sim 10^{-10}$ сек. (> 100000 шагов) не наблюдается. В первоначально бездефектной структуре пленки образуется большое количество радиационных дефектов – междоузельные атомы, вакансии, дивакансии, различные комплексы вакансий, в результате эволюции которых и происходит частичное залечивание поры.

Естественным продолжением изучения влияния ионного облучения на эволюции нанопоры являлось моделирование многократного облучения по такой же методике. В ходе данного компьютерного эксперимента через определенные промежутки времени τ последовательно возбуждались пять тепловых пиков, что соответствовало высокоинтенсивному облучению ($\tau = 3 \cdot 10^{-12}$ сек; поток ионов $3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-2}$). Отметим, что при ионной имплантации металлургическими дозами ($10^{16} - 10^{19}$ ион/см²) генерируется огромное число импульсов. Это должно приводить к закачке энергии как в поверхностную ионно-легируемую область, так и в дефектные области (границы зерен, области с повышенной концентрацией вакансий и т.д.), расположенные в глубине материала. Даже в хорошо отожженном металлическом кристалле плотность дислокаций может составлять 10^7 см^{-2} и выше.

Анализ атомной структуры кристаллита по плоскостям показал, что происходит полное залечивание нанопоры. После длительного (примерно 10^{-10} сек.) отжига отмечено, что атомные плоскости (001), в которых изначально была пора (номера плоскостей от 10 до 15) полностью достроились за счет атомов из соседних плоскостей; при этом все плоскости от поверхности пленки (с 5 плоскости) до 14-ой имеют практически бездефектную структуру. Совсем иная микроструктура образовалась вблизи другой поверхности пленки после залечивания поры: Было выявлено образование линейных дефектов – дислокаций (в том числе винтовых) и дислокационных петель (рис. 4).

Был проведен расчет вектора Бюргерса дислокационной петли, выходящей на поверхность кристаллита. Значение вектора Бюргерса $b = a / 2 [100]$. Там же Отмечено, что иррегулярные формы вакансионных кластеров, дислокационные петли вакансионного типа образуются ударным путем в каскадах атом - атомных соударений, а вакансионные поры - в большинстве случаев вследствие процессов отжига[5].

Рис. 4. Образование линейных дефектов и выход дислокационной петли на поверхность кристаллита при залечивании нанопоры.



Из анализа результатов компьютерных экспериментов, изложенного выше, можно сделать следующие обобщающие выводы: нанопора в чистом (беспримесном и изначально бездефектном) железе не является устойчивым объемным дефектом при

интенсивном облучении. В результате облучения происходит залечивание поры, а на ее месте образуются дислокационные петли и дислокации, а также большое количество вакансий; показан выход дислокационной петли на поверхность. Кристаллит имеет устойчивую ОЦК - структуру, области с дефектами структуры, такими как вакансии, МУА локализованы в пленке и не выходят на поверхность.

Дальнейшая часть работы была посвящена моделированию эволюции нанопоры в металлах с примесью водорода. Одной из целей проведения этой серии компьютерных экспериментов по растяжению образца являлось сравнение поведения поры в чистом железе и железе с примесью водорода при деформации и облучении. Количество водорода в пленке 7 ат.% (200 атомов водорода на 2900 атомов железа). В начальном состоянии системы водород помещался в октаэдрические междоузлия кристаллической решетки. Шаг по времени был уменьшен, и составлял $\tau = 0,5 \cdot 10^{-15}$ сек. Компьютерный эксперимент по исследованию поведения пленки с порой при растягивающих напряжениях фактически состоял из трех этапов характеризуемых относительным удлинением образца: 11%; 22% и 33%.

Изучая поведение водорода в кристаллите при растяжении, мы заметили, что водород, находящийся близко к поверхности (на глубине менее 4 – х слоев) диффундирует к поверхности. В объеме образца преимущественной диффузии водорода не отмечено, что согласуется с результатами других исследователей. Таким образом, очевидно, что влияние этого элемента сказывается на весь модельный кристаллит в целом и слабо зависит от места его сосредоточения. Вероятно, это связано с видом потенциалов парного взаимодействия. Глубина ямы ППВ водород - водород сравнима с глубиной ямы железо - водород и внедренные атомы водорода действуют на атомы железа, создавая дополнительную силу, удерживающую атом металла на своем месте. Кроме того, положение минимума ППВ Н - Н (0,24 нм) сравнимо с половиной постоянной решетки, следовательно, атом водорода хорошо помещается в октаэдрическую пору даже в недеформированном кристаллите. Микроскопическое поведение кристаллита при разрушении характеризуется как хрупкое. Разрыв пленки происходит при относительном удлинении = 22%, когда атомы железа выходят из потенциальной ямы. Перестройка атомов осложняется наличием водорода, который занимает октаэдрические междоузлия и при деформации растяжения является дополнительным сцепляющим элементом, лишаящим атомы железа подвижности, необходимой для перестройки при удлинении образца.

Зарождение нано трещины, проходящей через весь кристаллит, происходит на границах нанопоры в плоскости типа (001), на которых видна трещина,

проходящая через весь кристаллит. Атомы водорода на рисунках отмечены черным цветом. Обнаружено наличие деформации сдвигом, что характерно для пластической деформации (Рис.5).

При моделировании ионного облучения металлов с примесью водорода в системе можно выделить те же механизмы потерь энергии, что и в случае чистого железа. При этом, по – видимому, наличие водорода, внедренного в железо, оказывает (через изменение потенциалов парного взаимодействия) негативное влияние на устойчивость ОЦК - структуры. Анализируя расположение и движение атомов по плоскостям, иллюстрирующие увеличение поры после отжига и появления структурных изменений в кристаллите, которые не наблюдались ранее. Эти изменения могут быть вызваны деформационно-индуцированным фазовым переходом ОЦК – ГЦК.

По результатам компьютерных экспериментов, проведенным в этой главе, можно сделать следующие выводы: показано, что нанопора в чистом (беспримесном и изначально бездефектном) железе не является дефектом, оказывающей существенное влияние на систему при одноосном растяжении. При интенсивном облучении после залечивания поры и отжига наблюдаются сложные дефекты: дислокации и дислокационные петли, показан выход винтовой дислокации на поверхность. Тип кристаллической решетки сохраняется при ионном облучении и деформации. Наличие поры в железе с примесью водорода негативно сказывается на устойчивости пленки к механическим воздействиям. При этом зарождение трещины происходит именно вблизи нанопоры. При ионном облучении происходит увеличение размеров поры, что связано с нестабильностью ОЦК – решетки (для железа с такой концентрацией водорода) и внешние воздействия, такие как растяжение и ионное облучение передают системе энергию,

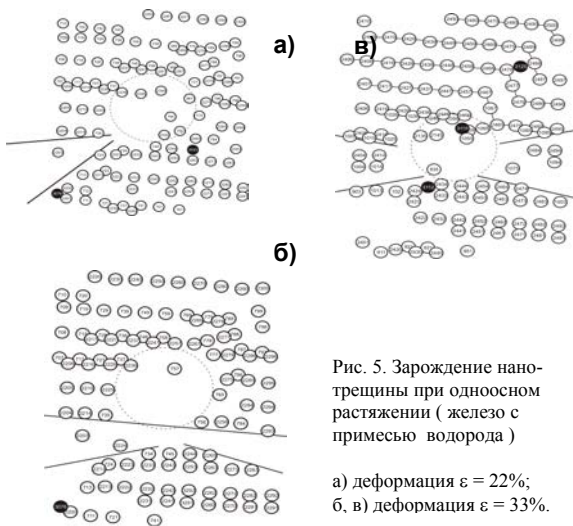
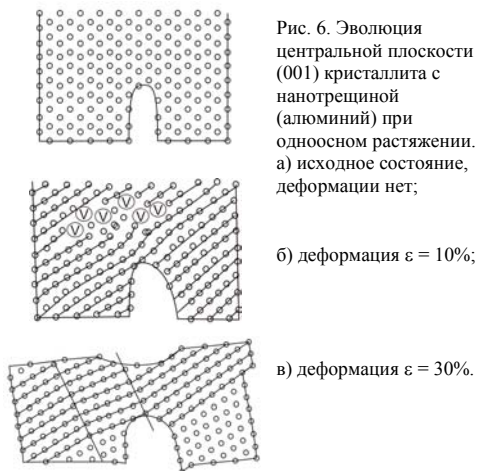


Рис. 5. Зарождение нанотрещины при одноосном растяжении (железо с примесью водорода)

а) деформация $\varepsilon = 22\%$;
б, в) деформация $\varepsilon = 33\%$.

достаточную для перехода к более глубокому минимуму потенциальной энергии.

В четвертой главе представлены результаты компьютерных экспериментов процесса разрушения при одноосном растяжении в модельных материалах с различным типом (ОЦК, ГЦК, ГПУ) кристаллической решетки, а также особенности их поведения при наличии примеси водорода. Механизмы зарождения трещин в данной главе не рассматриваются. Начальная конфигурация атомов кристаллита представляла собой трехмерную пленку, толщиной 24 атомных слоя для α -железа и 18 атомных слоев для алюминия и никеля, 22 атомных слоя для титана. Поверхность (001) являлась свободной, а на поверхности (100) и (010) накладывались циклические граничные условия. Размеры кристаллита вдоль направлений [100] и [010] равнялись 20 атомным слоям. Таким образом, в каждом компьютерном эксперименте рассчитывалась система 3000–4000 атомов. Водород вводился в октаэдрические поры в достаточно большом количестве ~5-7%, поскольку моделирование диффузии и скопления водорода в области концентраторов напряжений (устье трещины) ограничена огромными затратами вычислительного времени. В связи с этим следует говорить только о качественном, а не о количественном соответствии с известными моделями и экспериментами. Трещина моделировалась путем удаления части атомов из двух соседних плоскостей типа (010). Глубина трещины во всех случаях выбиралась равной 9 атомным слоям. Отвод энергии был подобран таким образом, чтобы кинетическая энергия оставалась неизменной при всех нагрузках (~300 К). Затем изучалась эволюция нанотрещины в процессе ионного облучения и релаксации системы. После ионного облучения к пленке прикладывались одноосные растягивающие напряжения в направлении [100] существенно выше критических. Проводилось сравнение результатов моделирования для облученных и необлученных образцов. Результаты моделирования одноосного растяжения алюминия (ГЦК-решетка) при последовательном растяжении кристаллита на 10, 20 и 30% показаны на рис.6.



На начальном этапе наблюдалось релаксация за счет образования дислокаций с самыми различными векторами Бюргерса: частичные дислокации Франка с вектором Бюргерса типа $a/3 \langle 111 \rangle$, образующие дислокационный диполь; частичные дислокации Шокли с вектором Бюргерса типа $a/6 \langle 112 \rangle$, образующие два дислокационных диполя и полные типа $a/2 \langle 110 \rangle$ дислокации, имеющие обрыв на поверхности нанотрещины. Полные дислокации энергетически невыгодны и их появление в данном случае вероятно связано с наличием трещины, о чем свидетельствует положение данных дислокаций. После растяжения на 30% произошла диффузионная перестройка структуры. Плоскости типа (100) развернулись на $\sim 10-15^\circ$ и сформировались двойники, кроме того, образовалась “шейка” напротив трещины. То есть, реализуется типичный случай вязкого разрушения [6] с пластической деформацией в устье трещины по дислокационному механизму. Сама трещина – затупленная, уширяется, но не распространяется.

При добавления в решетку алюминия примеси водорода ситуация, по-существу, изменяется мало, поскольку последний начинает немедленно покидать матрицу через свободные границы. Мы не наблюдали даже образования облаков Коттрелла на дислокациях. Это хорошо согласуется с экспериментальными результатами, т.к. известно, что алюминий – пластичный материал, а водород практически в нем не растворяется. Если он вводится методом имплантации или в процессе электролиза, то образует газовые пузыри, главным образом на границах зерен. Очевидно, что в реальной ситуации будут образовываться флокены либо на границах, либо в теле матрицы, но наши технические возможности не позволяют полностью смоделировать эти процессы до их завершения.

Эволюция микротрещины в никеле (ГЦК-решетка) при ионном облучении во многом совпадает с тем, что мы наблюдали в алюминии, но степень залечивания микротрещины меньше, и соответственно, разрушение модельного кристаллита происходит при меньших деформациях. Различие состоит в том, что залечивание нанотрещины после ионного облучения вызвано коллективным движением атомов с поверхности образца к устью трещины.

Моделирование железа с ОЦК-решеткой производилось по описанной схеме. В чистом (беспримесном) α -Fe также не происходит распространения нанотрещины в глубину пленки. Как и в алюминии, устье трещины закругляется, а ее длина уменьшается, концентрация напряжений в устье уменьшается. Послойный анализ движения атомов показал, что атомы с поверхности расположенные вблизи вершины трещины, вовлекаются внутрь кристаллита. Перемещение происходит не атомными рядами, а их отдельными фрагментами. Это приводит в итоге к появлению на месте бывшей трещины кристаллической области обогащенной вакансиями. Фактически происходит “самозалечивание” трещины. Однако, при наличии примеси водорода эволюция нанотрещины совершенно иная. На рис. 7 представлены результаты

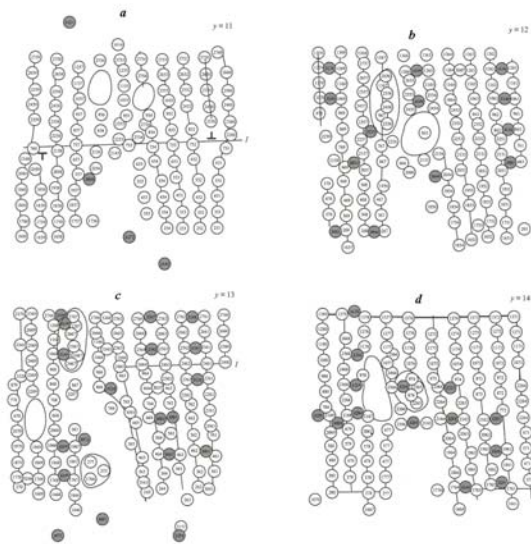


Рис. 7. Атомная структура соседних плоскостей (010) кристаллита вблизи устья трещины (железо с примесью водорода) при одноосном растяжении облученного кристаллита. l – линия сдвига, образование дислокаций.

моделирования в системе железо с примесью водорода. Известно, что уже примесь в сотые доли процента водорода приводит к водородному охрупчиванию железа, но это происходит за чрезвычайно большие по масштабам нашего моделирования времена (~100 часов и более). При этом наблюдается преимущественная диффузия атомов водорода к устью трещины [7]. В этом случае трещина не затуплялась, легко удлинялась, шейка не образовывалась, разворота кристалла не было. Пластической

деформации за счет образования дислокаций не наблюдалось. Распространение нанотрещины через кристаллит можно характеризовать как хрупкое разрушение. Однако наблюдавшийся атомный механизм ранее не был предсказан. Оказалось, что в результате введения водорода изменилась плотность свободных электронов и, следовательно, экранирование между атомами матрицы железа. Это привело к ОЦК→ГЦК фазовому переходу. Особенно интенсивно он происходит в устье трещины.

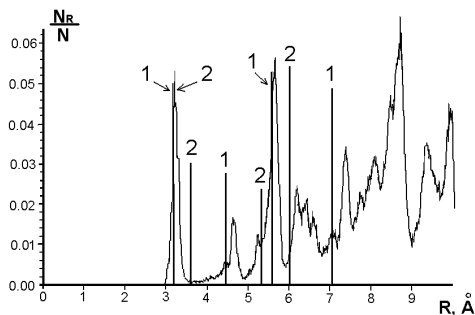


Рис. 8. Функции радиального распределения атомов железа в пленке Fe-N после релаксации ($\tau = 10^{-10}$ сек.) 1 – пики ГЦК решетки, 2 – пики ОЦК решетки.

На рис. 8. представлены функции радиального распределения атомов (ФРРА) после растяжения кристаллита на 30%. Видно, что на заключительном этапе моделирования система состоит из трех фаз: остаточной ОЦК, ГЦК и аморфной.

В дальнейшей работе было проведено моделирование процесса разрушения при одноосном растяжении в металлах с ГПУ – решеткой (на примере титана). Относительная деформация составляла $\epsilon = 5\%$, 10% , 15% , 20% . Анализ атомной структуры кристаллита показал, что после ионного облучения нанотрещина не залечивается, как в чистом алюминии и чистом железе, а трансформируется в микропору. При этом распространения области, обогащенной дефектами, вглубь кристаллита не происходит. Переход от трещины к поре происходит по вакансионному механизму, образование дислокаций не наблюдается. Группы атомов (по 3-5 атомов) с поверхности вовлекаются к устью трещины, в результате чего происходит частичное залечивание нанотрещины. В результате ионное облучение увеличивает прочность кристаллита и разрушение образца происходит при деформации $\epsilon \approx 15\%-20\%$, в то время как необлученный кристаллите трещина распространялась вглубь при $\epsilon \approx 10\%$, и происходило разрушение кристаллита (Рис.9). При одноосном растяжении облученного кристаллита на 5%, 10% и 15% распространение микротрещины вглубь не наблюдается. Происходит уширение микротрещины, перемещения отдельных атомов возможны только вдоль границ

микротрещины. Это связано, по-видимому, с тем, что плоскость, перпендикулярная микротрещине – это плоскость с плотнейшей упаковкой атомов и поэтому существует довольно высокий энергетический барьер для замещения атома в такой плоскости.

При растяжении кристаллита на 20% трещина распространяется вглубь на 2 атомных плоскости и одновременно уширяется. Радиус закругления в устье трещины при этом не изменяется. Это говорит о том, что концентрация напряжений в устье трещины тоже не изменяется и охрупчивание в чистом титане не наблюдается, а поведение образца при разрушении можно характеризовать как вязкое.

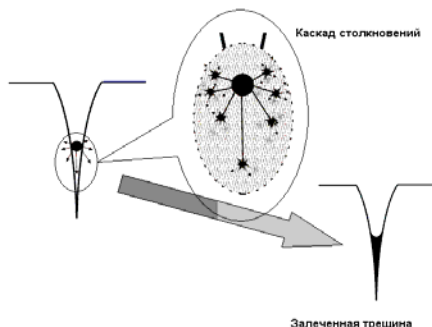


Рис.9 Изменение кривизны и залечивание устья нанотрещины, вызванное ионным облучением на конечной стадии каскада столкновений.

На основании полученных результатов можно предположить, что основную роль в изменении прочности поверхностных слоев металлов играет процесс залечивания микронесплошностей при ионном облучении. Причем залечивание нанотрещин и нанопор происходит на конечной стадии развития каскада столкновений в устье трещины или края поры. Развитие каскада столкновений (на стадии теплового пика) приводит при малых размерах микронесплошностей к их исчезновению, при сравнительно больших – к увеличению радиуса кривизны в устье трещины. Подобный процесс обеспечивает уменьшение напряжений в устье трещины и приводит к увеличению прочности модифицированных облучением слоев металла. Наличие примеси внедрения (в частности, водорода) может усложнить процесс поверхностного упрочнения.

Основные результаты и выводы: Методом молекулярной динамики впервые проведено систематическое исследование влияния ионного облучения на динамику поведения трехмерных нанодофектов в металлах с различным типом кристаллической решетки при одноосном растяжении.

Показано, что в чистых (беспримесных) металлах Fe, Al, Ti, Ni нанотрещина и нанопора при ионном облучении залечивается. В металлах с примесью водорода,

эволюция нанодфектов кардинально отличается от таковой в чистых металлах. Наличие нанопоры в железе с примесью негативно сказывается на устойчивости пленки к механическим воздействиям. При этом зарождение трещины происходит именно вблизи нанопоры и приводит к разрыву пленки при увеличении деформации до 33%. При облучении происходит увеличение размеров нанопоры и уменьшение прочности пленки при растяжении.

Выявлено, что механизмы и степень залечивания нанотрещины в процессе ионного облучения в металлах в первую очередь зависят от типа кристаллической решетки. Увеличение прочности кристаллита наблюдается для всех облученных образцов.

Результаты моделирования находятся в хорошем качественном согласии с экспериментальными результатами и имеющимися литературными данными.

1. В чистом α -Fe (ОЦК-решетка) залечивание нанотрещины происходит за счет перемещения отдельных фрагментов атомного ряда из приповерхностных слоев к устью нанотрещины, что приводит в итоге к появлению на месте бывшей трещины кристаллической области, обогащенной вакансиями.

2. Показано, что алюминий и никель (ГЦК-решетка) при одноосном растяжении после ионного облучения проявляет пластичность, образуя дислокации и двойники.

3. Показано, что в чистом (беспримесном) титане (ГПУ-решетка) распространение нанотрещин после ионного облучения не происходит. Устье трещины после ионного облучения залечивается, происходит трансформация нанотрещины в нанопору, что приводит к увеличению прочности кристаллита.

4. Увеличение концентрации водорода вблизи устья трещины в железе инициирует тенденцию к протеканию фазового $\alpha \rightarrow \gamma$ перехода. В результате этого наблюдается распространение трещины, то есть охрупчивание материала.

5. Моделирование трехмерных систем с ГЦК и ГПУ решеткой показало, что важную роль при охрупчивании играют особенности сил межатомного взаимодействия.

6. Наличие нанопоры в железе с примесью водорода негативно сказывается на устойчивости пленки к механическим воздействиям. При этом зарождение трещины происходит именно вблизи поры и приводит к разрушению кристаллита при увеличении деформации до 33%.

Основное содержание диссертации изложено в следующих публикациях:

1. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Влияние облучения на развитие приповерхностной поры в железе // Тез.докл. IV Всероссийск. семинара “Физические и физико-химические основы ионной имплантации”, Н. Новгород, 1998. с.84-85.
2. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Динамика развития приповерхностной поры в железе при ионном облучении // Book of Abstracts of the Second Intern. Conf. “Hydrogen Treatment of materials”, Donetsk, 1998. с.211.
3. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Компьютерное моделирование обратного рассеяния ионов гелия от поверхностей многокомпонентных мишеней // Поверхность. Физика, химия, механика, 1998. №3, с.79-83.
4. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Влияние ионной имплантации на динамику микротрещины в титане. // Тез.докл. V Всероссийск. семинара “Физические и физико-химич. основы ионной имплантации”, Н. Новгород, 2000. с.93-94.
5. Баранов М.А., Дроздов А.Ю., Чудинов В.Г., Баянкин В.Я. Атомные механизмы развития микротрещины в чистых ГЦК- и ОЦК-металлах и с примесью водорода. // ЖТФ, 2000. Т.70, Вып.4, с.46-51.
6. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Влияние ионной имплантации на динамику микротрещины в титане. Компьютерный эксперимент. // Тез.докл. Всеросс. конф. ”Дефекты структуры и прочность кристаллов”, Черногловка, 2002. с. 21.
7. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Исследование эволюции микротрещины в титане после ионного облучения. Компьютерный эксперимент. // Proceedings of 6-th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows, Tomsk, 2002. с.288-291.
8. Zhikharev A.V., Bystrov S.G., Bykov P.V., Drozdov A.Yu., Bayankin V.Ya. Morphology of surface of OT4 alloy after ion implantation and strength tests. // Phys. Low-Dim. Struct., 2002. 5/6, p.201-208.

9. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Исследование эволюции микротрещины в модельных металлах при ионной имплантации. Компьютерный эксперимент. // Материалы XVI Межд. конф. “Взаимодействие ионов с поверхностью” (ВИП-2003), Звенигород, 2003. Т.1, с. 137-140.
10. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Исследование влияния ионного облучения на эволюцию микротрещины в титане при одноосном растяжении. // Тез.докл.VII Межгосуд. семинара “Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий (МНТ -VII)”, Обнинск, 2003. с.43-44.
11. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Атомные механизмы развития микротрещины в титане при ионном облучении. // Тез. докл. 5-го Межд. Уральского семинара “Радиационная физика металлов и сплавов”, Снежинск, 2003, с.18-19.
12. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Исследование эволюции микротрещины в модельных металлах при ионной имплантации. Компьютерный эксперимент // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. №5, с. 76-80.
13. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Атомные механизмы развития микротрещины в титане при одноосном растяжении после ионной имплантации. // Вестник ННГУ, Серия ФТТ, 2004, вып.1(6), с. 111-118.
14. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Влияние ионного облучения на эволюцию атомно-острой трещины в никеле и алюминии в условиях растяжения. // Материалы XVII Межд. конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью” (ВИП-2005), Звенигород, 2005, т.1, с. 118-121.
15. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Влияние ионного облучения на эволюцию атомно-острой трещины в ГЦК-металлах в условиях растяжения. // Тез.докл.VIII Межгосуд. семинара “Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий (МНТ -VIII)”, Обнинск, 2005. с.74-75.
16. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Компьютерное моделирование эволюции атомно-острой трещины в никеле и алюминии при одноосном

растяжении после ионной имплантации. // Тез. докл. XLIV Межд. конференции “Актуальные проблемы прочности”, Вологда, 2005. с.133.

17. Дроздов А.Ю., Баранов М.А., Баянкин В.Я. Динамика развития протяженных дефектов в металлах при ионной имплантации и деформации. // Тез. докл. 7-го Межд. Уральского семинара “Радиационная физика металлов и сплавов”, Снежинск, 2007, с.130-131.

Цитируемая литература

1. Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М.: Мир. 1973. 557с.
2. Юрьев А.А. Модельный потенциал для простых и переходных металлов. Дисс. канд. физ.-мат. наук. - Свердловск. 1985. 198с.
3. Чудинов В.Г., Шудегов В.Е., Журавлев В.А. Влияние особенностей сил межчастичного взаимодействия на кристаллическую структуру и температуру $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения в сплавах на основе Fe // ЖТФ. 1996. Т. 66. №4. С. 84-91.
4. Риссел Х., Руге И. Ионная имплантация. М.: Наука 1983, 396с.
5. Судзуки Т., Есиага Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. Пер. с япон. М.: Мир. 1989. 296с
6. Гуляев А.П. Металловедение. – М. Металлургия. 1986. 544 с.
7. Вайнман А.Б., Мелехов Р.К, Смиян О.Д. Водородное охрупчивание элементов котлов высокого давления. Киев, Наукова Думка 1990, 355с.

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность к.ф.-м.н. М.А. Баранову за ценные замечания и обсуждение результатов работы.

Подписано в печать 10.10.2007. Формат 60x84 $\frac{1}{16}$

Усл. печ. л. 1,40. Уч. изд. л. 1,32.

Бумага офсетная №1. Тираж 100 экз. Заказ №307

НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”

426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.