

УДК 538.911

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СКОЛЬЖЕНИЯ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В ГЦК-КРИСТАЛЛЕ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УДАРНЫХ ВОЛН**

Маркидонов А.В., д.ф.-м.н., зав.каф. экономики и управления  
Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф.  
Горбачева, филиал в г. Новокузнецк  
г. Новокузнецк

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 дальнего 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 дальнего 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  $\sigma_x$  достигает максимума при прохождении через расчетную область фронта ударной волны, а касательное напряжение  $\tau_x$  – 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.

#### Список литературы:

1. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. Радиационно-динамические процессы в ГЦК кристаллах, сопровождающиеся высокоскоростным массопереносом. – Барнаул: ООО «Научно-исследовательский центр «Системы управления», 2014 – 191 с.

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.