

УДК 548.4; 539.42

DOI: 10.17223/00213411/64/7/24

*Д.С. КРЫЖЕВИЧ, А.В. КОРЧУГАНОВ, К.П. ЗОЛЬНИКОВ***ФОРМИРОВАНИЕ ИЗБЫТОЧНОГО АТОМНОГО ОБЪЕМА И ЕГО РОЛЬ
В ПРОЦЕССАХ РАЗРУШЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ НИКЕЛЯ ***

Проведено молекулярно-динамическое моделирование особенностей распространения трещины в монокристалле никеля при одноосном растяжении вдоль кубического направления. Обнаружено, что при комнатной температуре вблизи вершин раскрывающейся трещины формируются области с избыточным атомным объемом. В дальнейшем в этих областях образуются нанопоры, которые затем объединяются с трещиной, стимулируя высокоскоростное раскрытие. Показано, что если в области с повышенным атомным объемом на вершине трещины начинают формироваться дислокации, то в этом направлении скорость распространения трещины существенно снижается.

Ключевые слова: монокристалл, разрушение, никель, трещина, дислокация, избыточный атомный объем, одноосное растяжение, молекулярная динамика.

Введение

Изучение процессов разрушения – одна из основных проблем материаловедения, практической целью которого является повышение живучести и целостности разнообразных конструкций и изделий. Процессы разрушения во многом определяются стойкостью материалов к образованию трещин при различных видах нагружения. Распространение трещин в материалах является многомасштабным процессом. Его особенности существенно зависят от типа кристаллической структуры, ориентации решетки относительно направлений нагружения. Зарождение трещин всегда начинается на микроуровне, которому предшествуют определенные структурные трансформации и перераспределение напряжений в объеме материала [1–3]. Поле напряжений, формируемое приложенной нагрузкой, выступает в качестве причины зарождения трещины и движущей силы ее раскрытия.

На микроскопическом уровне распространение трещин в материалах возникает вследствие разрыва атомных связей. Из-за отсутствия границ зерен в монокристаллах распространение трещин тесно связано с дислокационным скольжением. Для изучения процесса разрушения в материалах использовались различные континуальные модели, однако они не позволяли учесть особенностей формирования и распространения трещин на атомном уровне [4–7]. Более глубокое изучение физической природы процессов разрушения основано на атомистическом моделировании. Молекулярно-динамический подход позволяет явно учесть все особенности дискретной структуры материалов на микроскопическом уровне и эффективно выявить атомные механизмы, определяющие процессы разрушения [8–11].

В рамках атомистического моделирования достаточно подробно исследовались особенности распространения внутрикристаллитных и межкристаллитных трещин. Для моделирования внутрикристаллических трещин в качестве объектов исследования выбираются монокристаллические или бикристаллические металлические образцы. В работе [12] на примере никеля было показано, что ориентация монокристалла относительно направления нагружения существенно влияет на характер зарождения и распространения трещин. Несмотря на то, что монокристаллы меди и алюминия имеют одинаковый тип решетки, механизмы зарождения и распространения трещин в них существенно различаются [13]. Так, для меди разрушение носит хрупкий характер, за исключением самых коротких трещин, а в образцах алюминия краевые трещины распространяются за счет зарождения и слияния пустот. В работе [14] было рассчитано поле напряжений и его эволюция вокруг вершины трещины в процессе ее раскрытия и исследованы зарождение и рост наноразмерных пустот в монокристаллическом алюминии. Авторы [15] провели анализ деформационных механизмов вблизи трещины в кристаллических материалах и показали, что ориентация кристалла существенно влияет на механизмы активации и развития разрушения.

* Работа выполнена в рамках госзадания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2021-0002.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>