УДК 621.785.53

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ С ВОДОРОДНОЙ АТМОСФЕРОЙ КОТТРЕЛЛА В АЛЬФА-ЖЕЛЕЗЕ

НАГОРНЫХ И.Л., БУРНЫШЕВ И.Н.

Институт механики Уральского отделения РАН, 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

АННОТАЦИЯ. В работе рассмотрено поведения краевой дислокации $\frac{a}{2}$ <111>{110}, содержащей атмосферу Коттрелла из атомов водорода, в железе. Полученные результаты могут быть применены при решении проблемы водородной хрупкости металлов в рамках HELP-модели (hydrogen enhanced localized plasticity). Показано, что при локальной концентрации водорода в железе менее 100 ppm напряжение сдвига краевой дислокации может снижаться в несколько раз.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: молекулярная динамика, моделирование, водородное охрупчивание, краевая дислокация, атмосфера Коттрелла, сдвиговое напряжение.

ВВЕДЕНИЕ

Влияние водорода на подвижность дислокаций вызывает большой научный интерес, прежде всего, из-за проблемы водородной хрупкости металлов. Один из наиболее популярных в настоящее время механизмов водородной хрупкости – HELP-механизм (hydrogen enhanced localized plasticity). Ключевая идея HELP-механизма водородной хрупкости состоит в том, что локализованные на дислокациях атомы водорода не блокируют дислокации, а, наоборот, увеличивают их подвижность.

По предложенному механизму водород может приводить к значительной локализации пластической деформации, в том числе вблизи стабильной трещины, размер которой не превышает критического значения. Локализация деформации, в свою очередь, может вызвать развитие такой трещины, то есть увеличение ее размеров до критических, когда трещина становится нестабильной, что вызовет ее необратимый рост, и скол на макроуровне уже может иметь хрупкий характер.

Увеличенная подвижность дислокаций подтверждается экспериментально. В работе [1] приводятся экспериментальные данные, согласно которым растворенный водород имеет тенденцию усиливать локализацию деформации, что может проявляться в ярко выраженных полосах скольжения на поверхности металла. На рис. 1 представлены результаты, приведенные в работе [2], авторы которой отчетливо показали перемещение линий дислокаций по направлению к границе зерна при наличии водорода в металле. Причиной перемещения дислокаций может быть только снижение сил отталкивания межу дислокациями и препятствиями для их движения. В данном случае препятствием является граница зерна.

Приведенный рисунок получен наложением двух микрофотографий. Темным обозначены линии дислокаций и условные номера дислокаций при нахождении образца в вакууме, светлым – после помещения образца в атмосферу водорода при давлении 12,6 кПа. Результаты, представленные на рис. 1, получены авторами [2] для нержавеющей стали и чистого алюминия, что позволяет исключить гипотезу о блокировании дислокаций в результате взаимодействия атомов водорода с примесями в металлах.

Усиление локализации деформации под действием водорода наблюдается не только на микроуровне, но и в макромасштабном уровне пластического течения. В частности, в работе [3] показано, что электролитическое наводороживание монокристалла аустенитной стали Fe-18Cr-12Ni-2Mo усиливает локализацию деформации при растяжении, приводит к значительному изменению характерных расстояний между полосами пластических сдвигов и увеличивает ширину зоны локализованной деформации (рис. 2).

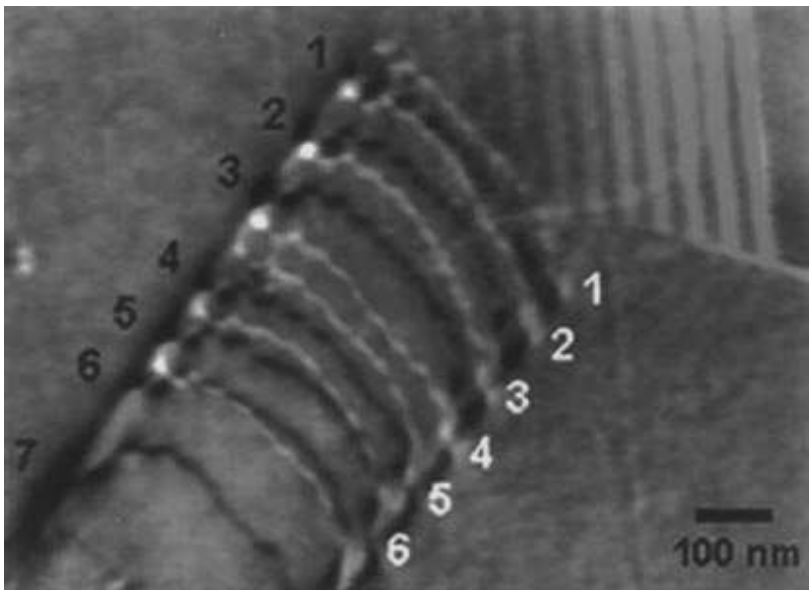
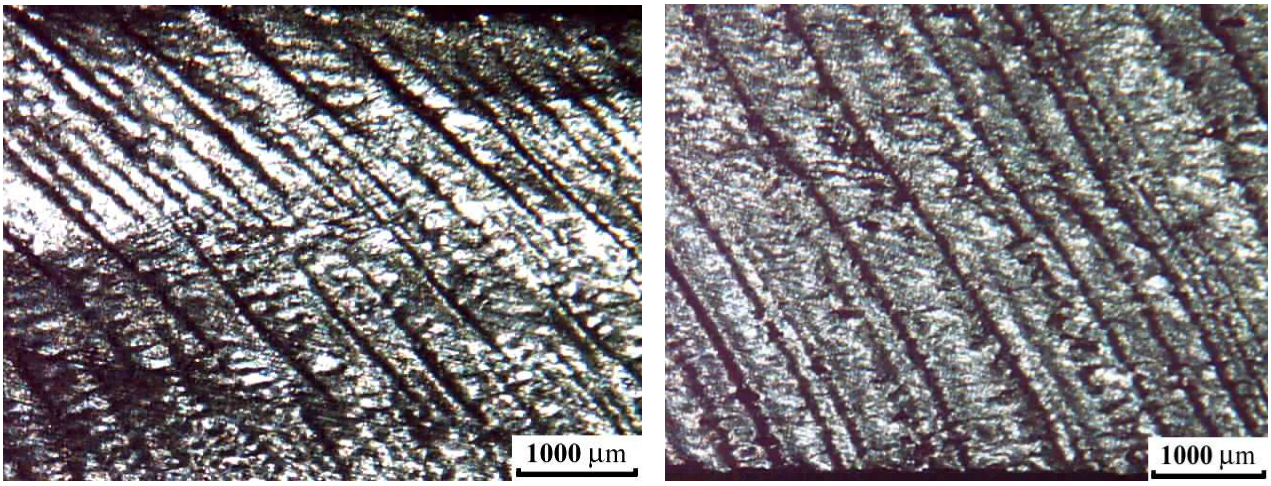


Рис. 1. Влияние водорода на расположение дислокаций вблизи границы зерна в нержавеющей стали



а) ***б)***

а) – без наводороживания;
б) – после предварительного электролитического наводороживания в течение 70 ч при T = 323 K

Рис. 2. Поверхность деформированного монокристалла на стадии разрушения

Следует заметить, что вопрос о механизме локализации деформации под действием водорода все еще остается дискуссионным. Так, интерпретация результатов работ [1, 2] сводится к модели экранирования водородом упругих взаимодействий между дислокациями и препятствиями для их движения. Авторы работ [2, 4, 5] также допускают, что в ОЦК металлах возможно влияние водорода на поведение дислокаций путем снижения напряжения Пайерлса-Набарро. При этом речь идет, как правило, о винтовых дислокациях. По мнению авторов [6] атомы водорода, сопровождая дислокации в процессе пластической деформации, локально усиливают металлический характер межатомных связей и снижают модуль сдвига в зоне расположения дислокаций, что приводит к возрастанию подвижности последних.

Другая идея состоит в том, что локализация пластического течения может быть связана с образованием и локализацией пор в определенных участках материала [7]. По мнению авторов [6] роль таких пор могут играть вакансии, генерируемые водородом внутри водородных атмосфер вокруг дислокаций в полосе скольжения.

Целью настоящей работы является изучение методом молекулярно-динамического моделирования влияния водородной атмосферы Коттрелла на изменение напряжения сдвига краевой дислокации в ОЦК железе.

МЕТОДИКА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

За основу взята молекулярно-динамическая модель, схематично изображенная на рис. 3. Данная модель представляет собой кристалл, ориентированный по кристаллографическим направлениям [111], [0-11], [-211], содержащий краевую дислокацию. Периодические граничные условия (ПГУ) накладываются вдоль линии дислокации ([-211], OZ) и по направлению вектора Бюргерса ([111], OX). По направлению [0-11] формируются две свободные поверхности.

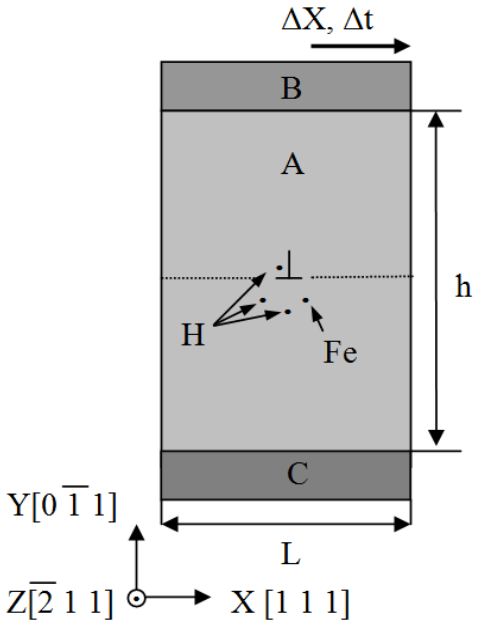


Рис. 3. Схема модели

Вычислительный эксперимент состоял из следующих этапов.

На первом этапе в расчетной области формировалась полная краевая дислокация $\frac{a}{2}$<111>{110}. Для формирования такой дислокации в идеальном кристалле ОЦК железа, удалялись три полуплоскости, образуя тем самым три экстраплоскости будущей краевой дислокации. Релаксация такого кристалла под действием внутренних напряжений приводит к образованию полной краевой дислокации $\frac{a}{2}$<111>{110}. Исходные размеры кристалла выбирались исходя из рекомендаций [8]. Параметры такой системы должны обеспечивать отсутствие взаимодействия между дислокацией и свободными поверхностями (0-11). Применение периодических граничных условий в направлении <111> приводит к появлению периодических образов дислокации, что позволяет говорить в данном случае лишь о бесконечном скоплении одинаковых краевых дислокаций, расположенных друг от друга на расстоянии L = 10 нм. Общее число атомов в системе не превышало 50000, что, как было показано в работе [8], является достаточным.

Для придания устойчивости дислокации в междоузлие вблизи нее внедрялся один атом железа (рис. 3). Такой точечный дефект повышает напряжение, необходимое для перемещения дислокации, что позволяет проводить измерения напряжения сдвига в системе на фоне «шума», вызванного тепловыми колебаниями.

Наличие равновесного количества точечных дефектов в реальных металлических системах не подвергается сомнению, при этом точечные дефекты преимущественно располагаются вблизи ядер дислокаций [9]. Как следствие, наличие точечного дефекта вблизи дислокации приближает рассматриваемую модель к реальному металлическому кристаллу. Для формирования атмосфер Коттрелла в систему добавлялись атомы водорода, как это показано на рис. 3.

В реальных металлах охрупчивание происходит при средней концентрации водорода в образце ~ 10 ат. ppm. При этом в вершинах трещин концентрация водорода выше на два порядка и составляет ~ 10^3 ат. ppm [10]. Концентрация водорода в рассматриваемой модели составляет 100 ат. ppm, что отвечает требованиям сверхнизкой средней концентрации водорода в металлических системах.

На втором этапе атомам областей **B**, **C** присваивались нулевые значения скоростей. В дальнейшем значения скоростей атомов областей **C** остаются нулевыми в течение всего времени расчета.

На третьем этапе производили мгновенное смещение атомов области **B** на величину 0,001 нм вдоль оси OX с последующей релаксацией системы в течение времени 0,5 пс. Такой режим обеспечивает движение "подложки" **B** со скоростью ~ 2 м/с. Во время релаксации скорости атомов области **B** остаются нулевыми. Эта операция повторяется до окончания расчета.

Все расчеты проводились по схеме Верле с шагом по времени 10^{-3} пс для температур 300 К. Потенциалы межатомного взаимодействия рассчитаны в приближении метода погруженного атома (EAM – embedded atom method) [11]. В процессе расчета проводилось измерение сдвигового напряжения δ_{xy} в слое толщиной 2 нм, содержащем плоскость скольжения, по классической теореме вириала и фиксировалось положение дислокации.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты моделирования систем после фильтрации тепловых колебаний представлены на рис. 4, где приводятся временные зависимости сдвигового напряжения δ_{xy}. На графиках (рис. 4) отчетливо видна линейная область (участок от 0,05 до 0,44 нс для системы Fe, участок от 0,05 до 0,3 нс для системы Fe-H), когда движение краевой дислокации незначительно и имеет «упругий» (обратимый) характер.

В определенный момент времени (0,44 нс для системы Fe и 0,3 нс для системы Fe-H) напряжение в атомарном слое, содержащем плоскость скольжения, достигает величины, необходимой для перемещения дислокации.

Дальнейшее перемещение дислокации приводит к релаксации сдвигового напряжения в кристалле и напряжение не снижается. При этом атмосфера Коттрелла из атомов водорода и внедренный атом железа перемещаются вместе с дислокацией. Следует отметить, что такое поведение дислокаций с атмосферой Коттрелла (состоящей из атомов водорода) и точечным дефектом качественно совпадает с поведением дислокации в идеальном кристалле.

Из анализа рис. 4 следует, что напряжение, необходимое для сдвига дислокации в системе Fe составляет ~ 1200 МПа, а в системе Fe-H ~ 400 МПа. Это означает. что присутствие водорода в металлической системе в виде атмосферы Коттрелла может снижать напряжение, необходимое для сдвига дислокации, в несколько раз.

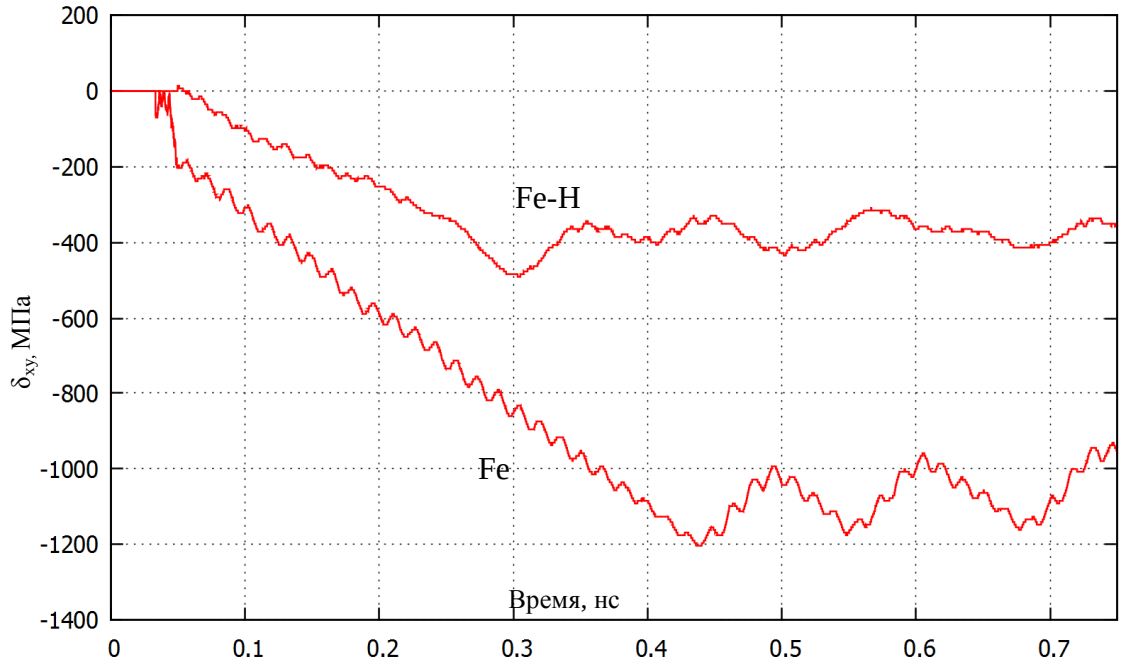


Рис. 4. Сдвиговое напряжение в системах Fe и Fe-H после фильтрации высокочастотных тепловых колебаний

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрена система, локальная концентрация водорода в которой не превышает 100 ppm. При столь малой концентрации водорода напряжение, необходимое для сдвига полной краевой дислокации $\frac{a}{2}$<111>{110}, снижается в несколько раз по сравнению с соответствующим напряжением сдвига в чистом железе. Выполненный расчетный эксперимент показал, что в ОЦК металлах водород влияет на напряжение сдвига как винтовых дислокаций, так и краевых дислокаций.

Основываясь на полученных результатах, можно предположить, что водород в малых количествах может вызвать значительную локализацию пластической деформации. Локальная пластическая деформация вблизи зародыша трещины в хрупком металле может являться достаточным условием для развития такого зародыша в трещину с размерами, превышающими критические, когда дальнейшее разрушение образца может иметь необратимый хрупкий характер.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 13-01-96051).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Abraham D.P., Altstetter C.J. Hydrogen-enhanced localization of plasticity in an austenitic stainless steel // Metallurgical and Materials Transaction: A. 1995. V. 26, № 11. P. 2859-2871.

2. Ferreira P. J., Robertson I. M., Birnbaum H. K. Hydrogen effects on the interaction between dislocations // Acta mater. 1998. V. 46, № 5. P. 1749-1757.

3. Баранникова С.А., Шляхова Г.В., Надеждин М.В., Зуев Л.Б. Локализация пластической деформации в ГЦК-сплавах при электролитическом насыщении водородом // Вестник ПНИПУ. Серия Механика. 2012. № 2. С. 20-33.

4. Matsui H., Kimura H., Moriya S. The effect of hydrogen on the mechanical properties of high purity iron. 1 Softening and hardening of high purity iron by hydrogen charging during tensile deformation // Material Science and Engineering. 1979. V. 40, № 2. P. 207-216.

5. Matsui H., Kimura H., Moriya S. The effect of hydrogen on the mechanical properties of high purity iron. 2 Effect of quenched-in hydrogen below room temperature // Material Science and Engineering. 1979. V. 40, № 2. P. 217-225.

6. Гаврилюк В.Г., Шиванюк В.Н. Взаимодействие водорода с конструкционными материалами на основе железа // Металловедение и термическая обработка металлов. 2008. № 6. С. 11-15.

7. Teirlinck D., Zok F., Embury J.D. and Ashby M.F. Fracture mechanism maps in stress space // Acta Metal. 1988. V. 36, № 5. P. 1213-1228.

8. Нагорных И.Л., Бурнышев И.Н. О моделировании движения краевых дислокаций в оцк-железе // Химическая физика и мезоскопия. 2014. Т. 16, № 1. С. 135-139.

9. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций / пер. с англ. / под ред. Э.М. Надгорного, Ю.А. Осипьяна. М. : Атомиздат, 1972. 600 с.

10. Stroe M.E. Hydrogen embrittlement of ferrous materials. Ph. D. thesis. Belgium. 2006.
URL: http://theses.ulb.ac.be/ETD-db/collection/available/ULBetd-03312006-122217/unrestricted/HydrogenEmbrittlementofFerrousMaterials.pdf (дата обращения 04.10.2014).

11. Wen M., Xu X-J., Fukuyama S, Yokogawa K. Embedded-atom-method functions for the body-centered-cubic iron and hydrogen // J. Mater. Res. 2001. V. 16. P. 3496-3502.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF AN EDGE DISLOCATION WITH HYDROGEN COTTRELL ATMOSPHERE IN IRON BEHAVIOR

Nagornykh I.L., Burnyshev I.N.

Institute of Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Izhevsk, Russia

SUMMARY. In the present work a behavior of an edge dislocation $\frac{a}{2}$<111>{110} with hydrogen Cottrell atmosphere in iron have been considered. The obtained results can be applied at solving the problem of hydrogen embrittlement of metals within a HELP-model (hydrogen enhanced localized plasticity). It has been shown that at a hydrogen concentration less than 100 ppm a shear stress of an edge dislocation may be reduced by several times.

KEYWORDS: molecular dynamics, simulation, the edge dislocation, the Burgers vector, the Peierls-Nabarro stress.

Нагорных Иван Леонидович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник ИМ УрО РАН

Бурнышев Иван Николаевич, кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник ИМ УрО РАН,
e-mail: inburn@mail.ru