

## ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА ПОДВИЖНОСТЬ ДИСЛОКАЦИЙ: РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Бурнышев И.Н., Нагорных И.Л.

Институт механики УрО РАН, г. Ижевск, Россия, E-mail: inburn@mail.ru

### Введение

Наиболее популярными механизмами водородного охрупчивания металлов в настоящее время считаются: механизм индуцированной водородом атомной декогезии (HEDE-механизм), механизм вызванной водородом локальной пластичности (HELP-механизм) и механизм образования хрупких гидридов.

Основная идея механизма HEDE состоит в том, что водород, скапливаясь в устье трещины, приводит к локальному уменьшению прочности связей между атомами металла, что создает условия для распространения трещины. HEDE-механизм является дискуссионным из-за недостатка фактов, хорошо подтверждающих данный механизм

Ключевая идея HELP-механизма состоит в том, что локализованные на дислокациях облака Коттрелла не блокируют дислокации, а, наоборот, усиливают их подвижность. Если рассматривать механизм разрушения металла, при котором распространение трещин осуществляется посредством подвижных дислокаций, то локализация пластической деформации приведет к более легкому разрушению образца. Идеи HELP-механизма хорошо подтверждаются экспериментальными данными, однако отсутствует теоретическое обоснование такого поведения дислокаций. Целью настоящей работы является молекулярно-динамическое обоснование влияния водорода на подвижность дислокаций и разработка качественной модели водородного охрупчивания материалов на основе железа.

**Постановка вычислительного эксперимента.** Полные дислокации в ОЦК решетке с вектором Бюргерса  $\frac{a}{2} \langle 111 \rangle$  ( $a$  – параметр решетки) обладают наименьшей энергией и встречаются чаще остальных. Скольжение в этом случае может осуществляться по плоскостям  $\{110\}$ ,  $\{211\}$ . В качестве модельной выбрана дислокация  $\frac{a}{2} \langle 111 \rangle \{110\}$ , движущаяся в кристалле ОЦК-железа, содержащем собственные межузельные атомы и внедренные атомы водорода.

При формировании модели за основу взята молекулярно-динамическая модель [1], схематично изображенная на рисунке 1а. Данная модель представляет собой содержащий краевую дислокацию кристалл, ориентированный по кристаллографическим направлениям  $[111]$ ,  $[0\bar{1}1]$ ,  $[\bar{2}11]$ . Периодические граничные условия накладываются вдоль линии дислокации ( $[\bar{2}11]$ , OZ) и по направлению вектора Бюргерса ( $[111]$ , OX).

При моделировании проводится присвоение нулевых значений скоростям атомов областей В и С, приведенных на рисунке 1а. В дальнейшем значения скоростей атомов области С остаются нулевыми за все время расчета. Затем осуществляется мгновенное смещение атомов области В на величину  $\Delta X = 0,001$  нм вдоль оси OX с последующей релаксацией системы в течение времени 5 пс. Во время релаксации скорости атомов области В остаются нулевыми. Для расчета сил межатомного взаимодействия применялся EAM-потенциал [2]. В процессе расчета проводилось измерение сдвигового напряжения  $\sigma_{xy}$  по классической теореме вириала и фиксировалось положение дислокации. Зависимость  $\sigma_{xy}$  от времени при температуре  $T = 0,1$  К и соответствующая величина сдвига  $\Delta D$  приведены на рисунке 1б.

Полученная в работе величина напряжения Пайерлса-Набарро  $\sigma_{xy} = 75$  МПа хорошо согласуется с литературными данными.

### Моделирование отрыва краевой дислокации от блокирующего ее точечного дефекта при $T = 300\text{ K}$

В рассмотренную выше модель внесен точечный дефект в виде одного собственного межузельного атома. Наличие атома вблизи дислокации представляет собой дефект, препятствующий свободному перемещению дислокации. Наличие равновесного количества точечных дефектов в реальных металлических системах не подвергается сомнению, при этом точечные дефекты преимущественно располагаются вблизи ядер дислокаций [3].

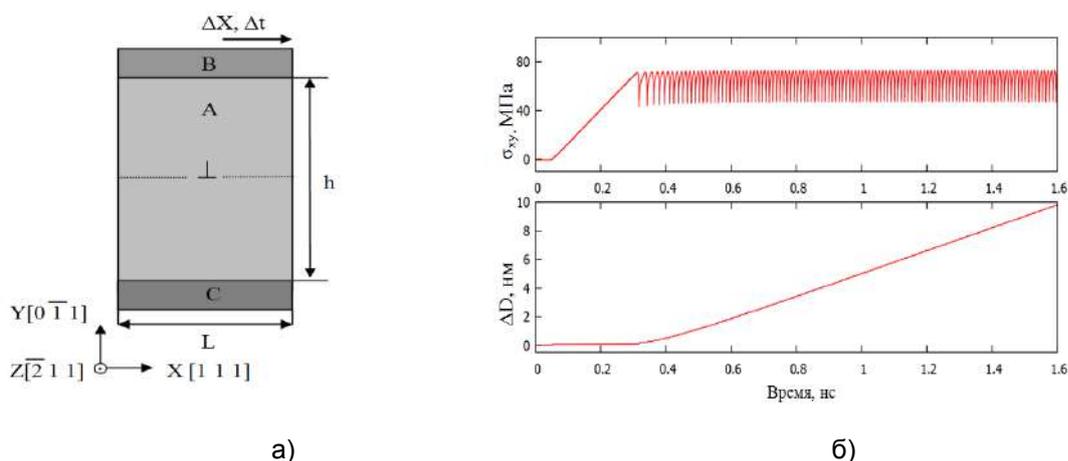


Рисунок 1 – Структура модели кристалла с краевой дислокацией (а) и сдвиговое напряжение с соответствующим ему по времени сдвигом дислокации (б)

Результаты моделирования такой системы приведены на рисунке 2. В течение времени от 0 нс до 0.5 нс происходит увеличение сдвигового напряжения в системе. В течение времени от 0.5 нс до 1 нс наблюдается волнообразное изменение напряжения, обусловленное диффузионными процессами. В момент времени 1 нс начинается резкое уменьшение накопленных напряжений (релаксация), возникающее из-за отрыва дислокации от дефекта (внедренного атома Fe). Орыв дислокации от блокирующего ее дефекта происходит при напряжении.

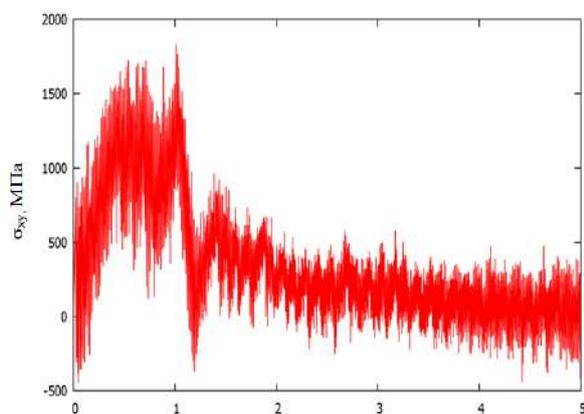


Рисунок 2 – Сдвиговое напряжение, возникающее в кристалле, содержащем краевую дислокацию и внедренный собственный атом

Стоит отметить, что введение еще одного атома Fe в область, непосредственно прилегающую к ядру дислокации, увеличивает напряжение отрыва до .

Результаты моделирования поведения системы с водородной атмосферой Коттрелла, приведенные на рисунке 3, позволяют определить напряжения отрыва дислокации при различной концентрации водорода. Так, при отсутствии в системе атомов водорода напряжение отрыва дислокации составляет, в системе с одним атомом водорода (20 ат. ppm) снижается до 1000 МПа, в системе с восемью атомами водорода (160 ат. ppm) снижается до (500-600) МПа.

Зависимость от концентрации водорода приведена на рисунке 4.

### Заключение

Полученные результаты, приведенные на рисунке 4, свидетельствуют о том, что водород влияет на поведение дислокаций принципиально по-иному, нежели другие

элементы. Как правило атмосферы Коттрелла препятствуют движению дислокаций, в том время как полученные результаты свидетельствуют об обратном для атмосфер Коттрелла из водорода. Получено убедительное, на наш взгляд, свидетельство того,

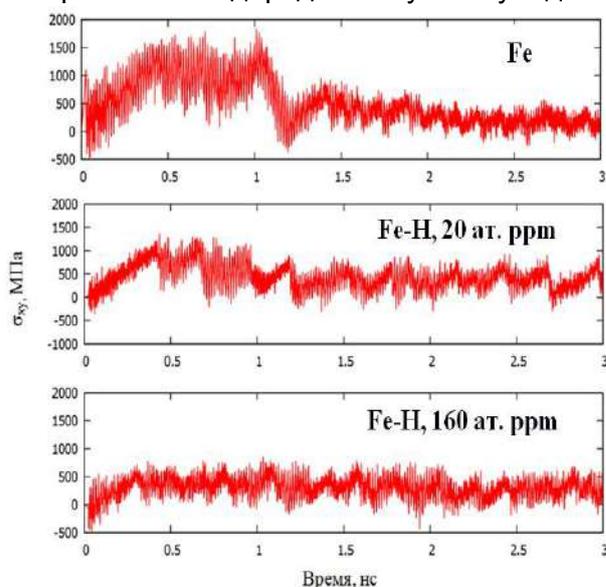


Рисунок 3 – Сдвиговое напряжение в молекулярно-динамической модели при различном содержании водорода

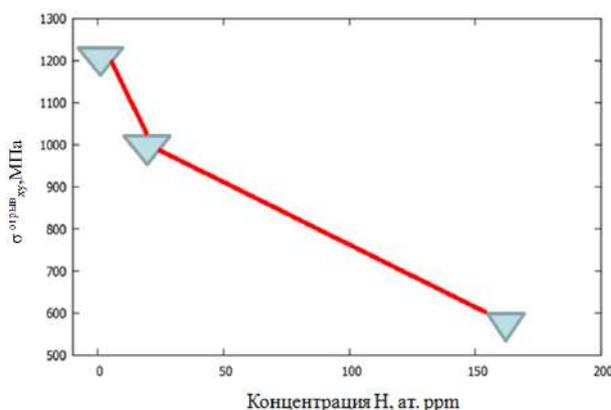


Рисунок 4 – Напряжение отрыва краевой дислокации от блокирующего ее точечного дефекта при различном содержании водорода

что водород облегчает отрыв дислокаций от препятствующих их движению барьеров. Это означает, что дислокация с атмосферой Коттрелла из атомов водорода легче преодолевает препятствия для своего движения, а водород тем самым увеличивает их подвижность.

Авторы полагают, что результаты моделирования позволяют точнее сформулировать HELP-модель водородной хрупкости металлов. Действительно, повышенная подвижность дислокаций в металлической системе при наличии водорода облегчает локальную пластическую деформацию в вершине трещины, облегчает ее рост, вызывая тем самым вязкое «ямочное» разрушение. В случае хрупкого металла водород облегчает рост трещины до её критических размеров, и дальнейшее разрушение может происходить уже независимо от влияния водорода на свойства металла.

#### Список литературы:

1. 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.
2. 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. -16. -P. 3496-3502.
3. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. Перев. с англ. под ред. Э.М. Надгорного, Ю.А. Осипьяна. М.: Атомиздат. 1972. -600 с.