

энергию в верхних слоях в большей степени изменяют структуру нижнего слоя полиимида.

При увеличении плотности облучения ионами гелия до 10^{16} см⁻² наблюдается:

1) Дальнейшее изменение спектральных зависимостей функции $\cos\Delta$ по сравнению как с исходным образцом так и с облучённым ионами гелия с плотностью 10^{13} см⁻² (см. кр. 5, 6 на рис. 1–3).

2) Различия для поверхностей остаются, но они относительно меньше, чем для двух предыдущих образцов.

3) Зависимости для функции $\text{tg}\Psi$ никаких существенных изменений не претерпели ни по значениям функции ни по ходу кривых.

Это всё говорит о том, что при такой плотности излучения структура полиимида с обеих сторон меняется существенно, это может привести к значительному изменению оптических характеристик.

Таким образом, облучение ионами гелия приводит к изменению структуры плёнок полиимида при этом не идет их разрушение, а наоборот лицевая и тыльная стороны по своим оптическим характеристикам выравниваются.

Список литературы

1. Горшков В.И. Эллипсометрия. – М.: Сов. Радио, 1974. 200с.
2. В. И. Ковалев, А.И. Руковишников, Приборы и Техника эксперимента.-2003.- №2.- Р. 164-167с.
3. Энциклопедия полимеров. Ред. коллегия: В.А. Кабанов (глав. ред.) [и др.] Т. 2– М.: Советская энциклопедия, 1974.
4. Гусев С. С., Старовойтов Л. Е., Рыжков О. В., Альхимович О. Б., Томов А. В., Пахоменко А. Н. Спектры поглощения полиимидов. Оптика неоднородных структур – 2007: материалы международной научно – практической конференции (2 – 3 октября 2007г.) - Могилёв: МГУ им. А. А. Кулешова, 2007. – с. 47 – 50.

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ ЖЕЛЕЗА: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Нагорных И. Л., Бурнышев И. Н.

ИПМ УрО РАН, г. Ижевск, РФ,
inburn@mail.ru

К возможным механизмам изменения механических свойств металлических систем в присутствии водорода относят механизм атомной декогезии HEDE (Hydrogen-enhanced decohesion) и механизм усиленной водородом локальной пластичности металла HELP (Hydrogen-enhanced local plasticity). Существует еще третий основной механизм, связанный с образованием хрупких гидридов, однако он признан для железа несостоятельным.

Целью настоящей работы является исследование атомистики поведения систем Fe–H в наномасштабных областях на стадиях упругой, пластической деформаций, а также в процессе разрушения материала.

В работе проведен ряд численных расчетов методом классической молекулярной динамики. Расчеты проведены с использованием потенциалов межатомного взаимодействия в ЕАМ приближении.

Системы для моделирования формировались следующим образом. В идеальном кристалле ОЦК-Fe удаляли несколько полуплоскостей $\{001\}$; получившийся объемный дефект представлял собой трещину. В область сформированного дефекта помещалось

различное количество атомарного водорода. Сформированная таким образом система подвергалась одноосному растяжению вдоль направления, перпендикулярного поверхностям, образующим трещину. Деформация изменялась поэтапно на 1% с последующей выдержкой в течение 3 ps. Расчеты показали, что такая выдержка является достаточной для релаксации системы, а именно, такие параметры как атомные напряжения, внутренняя энергия и постоянная решетки релаксируют к определенным средним постоянным значениям. Поэтому нагружение и деформация в подобном моделировании являются реализацией режима квазистатического нагружения, и высокая скорость деформирования ($\sim 10^8/s$) является в определенной мере физически обоснованной для моделирования деформаций, так как времена релаксации в процессе деформирования на нано- и макроуровнях значительно отличаются. Деформации проводились до полного разрушения «образца». В процессе деформирования снимались диаграммы растяжения.

В работе применены потенциалы межатомного взаимодействия, предложенные в работе [1]. При составлении набора потенциальных функций для системы Fe–H авторы [1] использовали взаимодействие Fe–Fe из источника [2]. Особенно важно отметить, что потенциальные функции Fe–Fe [2] хорошо подогнаны как под свойства низкотемпературной ОЦК-фазы железа (α -Fe), так и под свойства высокотемпературной ГЦК-фазы железа (γ -Fe). Данное обстоятельство особенно важно, поскольку ранее сообщалось [3] о появлении фазы γ -Fe в системе Fe–H при комнатной температуре. Кроме того, для сравнения все расчеты проведены с использованием EAM потенциалов [4].

Движение атомов рассчитывалось методом классической молекулярной динамики (МД) с применением скоростного алгоритма Верле с временным шагом интегрирования 10^{-16} s. Для поддержания постоянных температуры и давления применялись термостат и баростат Берендсена с постоянной времени релаксации 10^{-13} s. Расчеты проведены программными пакетами «LAMMPS» и «MDOMP», разработанных авторами настоящей работы.

На рис.1 представлены результаты моделирования деформаций кристалла, содержащего 2 трещины, в одной из которых находится 1440 атомов водорода. Трещины получены удалением 360 атомов Fe. Из рисунка видно разрушение материала при деформации, превышающей 30 %, а в области материала, содержащего трещину без водорода, следов разрушения не отмечено. При очень малой концентрации водорода в трещине качественная картина поведения системы Fe–H не изменяется, но для разрушения требуется большая деформация. Так, при количестве атомов водорода в трещине 100 аналогичное разрушение происходит при деформации ~ 50 %.

Необходимо отметить, что во всех расчетах разрушению материала предшествовала стадия пластической деформации. Пластическая деформация в бездислокационных кристаллах обусловлена образованием двойниковых структур и перераспределением водорода в материале (диффузионной пластической деформацией), о чем речь пойдет ниже.

Для более подробного изучения влияния водорода на упругие и пластические свойства материала, систему, представленную на рис. 1, разделили на подсистемы. В каждой такой системе трещина образована удалением 360 атомов Fe. На рис. 2 представлены диаграммы растяжения таких систем. Из анализа диаграммы растяжения для системы, содержащей водород, следует, что стадия текучести, когда образец может деформироваться без приложения дополнительного внешнего напряжения, наступает при деформации 3 %. Стадия текучести обусловлена повышением растворимости водорода в тетрагональном железе в процессе деформирования, а также его перераспределением в вершине трещины. В системе без водорода текучесть (пластическая деформация) наступает при 7 % деформации.

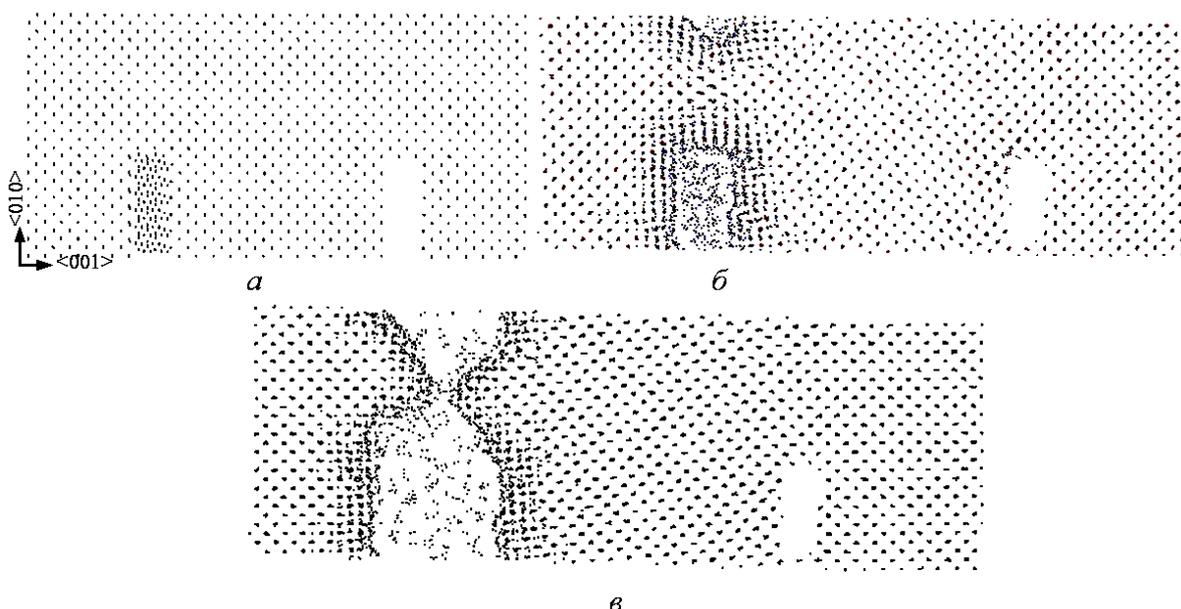


Рис. 1. Поведение кристалла при деформации: а) начальное состояние системы, б) деформация 25 %, в) деформация 33 %

Из анализа результатов расчетов можно сделать вывод, что в присутствии водорода снижаются напряжения, необходимые для образования двойников. Появление двойников значительно облегчает распространение трещины. Это обусловлено тем, что в сильно искаженных областях кристалла уменьшается сопротивление отрыву [5]. Во всех проведенных расчетах стадии разрушения всегда предшествовала стадия пластической деформации с образованием двойников. Это позволяет сделать вывод о том, что разрушение на наномасштабе в присутствии водорода происходит пластически. Причем пластическая деформация обусловлена как двойникованием, так и перераспределением атомов Н в вершине трещины.

В ходе работы были проанализированы свойства материала в вершине трещины, где концентрация водорода в твердом растворе максимальна. Прочность материала в данной области отличается не более чем на (30-40) % от теоретической прочности идеального кристалла Fe и составляет ~ 8 GPa. HEDE-механизм может иметь место в реальных металлах только тогда, когда прочность материала в вершине наводороженной трещины совпадает по порядку величины с пределом текучести металла [6] (25 МПа для чистого железа, 500–1000 МПа для сталей, подверженных водородной хрупкости). Полученная величина теоретической прочности наводороженного железа (7 ГПа) значительно превосходит предел текучести железа (25 МПа), следовательно, транскристаллитное разрушение по HEDE-механизму маловероятно.

Отсюда, можно предположить, что основным механизмом в охрупчивании систем на основе Fe при транскристаллитном разрушении является HELP-механизм, связанный с распространением трещины при участии дислокаций, или механизм, связанный с совместным действием HELP- и HEDE-механизмов. Тем не менее допускается, что HEDE-механизм в чистом виде может являться причиной интеркристаллитного разрушения, проходящего по границам зерен.

Снижение напряжений на диаграмме растяжения для системы Fe-H по сравнению с чистым Fe (рис. 2) связано с HEDE механизмом (в бездислокационном кристалле) и локальной диффузионной пластической деформацией. Разрушение в областях, близких к наводороженной области (рис. 1), обусловлено сильным локальным искажением решетки из-за присутствия водорода, что облегчает распространение трещины [5].

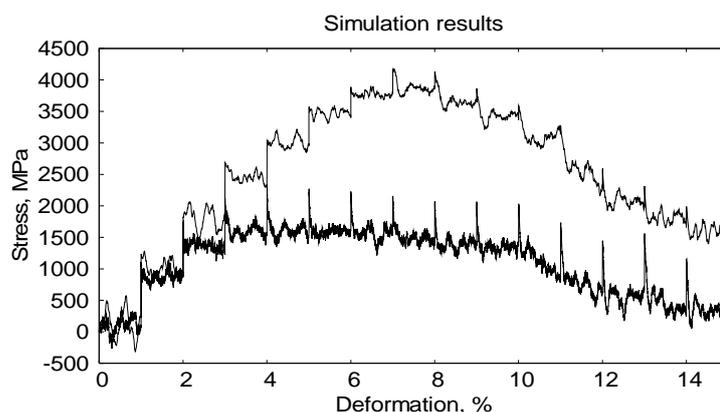


Рис. 2. Диаграммы растяжения систем Fe-H (нижняя кривая) и Fe (верхняя кривая)

Список литературы

1. Нагорных, Бурнышев, Бесогонов. В печати
2. Chamati H., Papanicolaou N.I., Mishin Y., Papaconstantopoulos D.A. Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe(100) // Surface Science. 2006. № 600(9). P. 1793.
3. 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 // Журнал технической физики. 2000. № 70 (4). С. 46
4. 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.
5. Котречко С.А., Филатов А.В., Овсянников А.В. Атомистика разрушения ОЦК-металлов в нанобъеме // Металлофизика и новейшие технол., 27, 7, с.с. 875-887 (2006)
6. Баранов В.П., Сергеев Н.Н. Кинетика замедленного разрушения высокопрочных сталей в инактивных и водородсодержащих средах // РЖ 19Б-2. Физическая химия (Кристаллохимия. Химия твердого тела. Газы. Жидкости. Аморфные тела. Поверхностные явления. Химия коллоидов), 22, 2006

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УПРУГИХ И МАГНИТОПРУГИХ ХАРАКТЕРИСТИК ФЕРРОМАГНИТНЫХ СТАЛЕЙ ДЛЯ ОЦЕНКИ СТЕПЕНИ НАВОДОРОЖИВАНИЯ

Ильясов Р. С. , Главатских М. Ю. *, Бурнышев И. Н. **, Лыс В. Ф. **

* Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия,
emp@fti.udm.ru

** Институт прикладной механики УрО РАН, г. Ижевск, Россия,
inburn@mail.ru

Разработка неразрушающих методов оценки степени наводороживания конструкционных материалов играет очень важную роль для предотвращения разрушений технических объектов водородной, атомной и ядерной энергетики, транспорта, химической и нефтегазовой промышленности, которые могут привести к техногенным катастрофам со значительными социально – экономическими последствиями. На сегодняшний день нельзя считать, что данная техническая проблема окончательно решена, хотя известно, что водород накапливающийся в металле изменяет целый ряд его физико-механических характеристик [1]. Для решения этой проблемы в данной работе принята попытка использования упругих и магнитоупругих характеристик, формирующих параметры двойного резонансного электромагнитно-акустического преобразо-