

УДК 539.374+539.386+539.5

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ В АЛЮМИНИИ

© 2008 г. А. Ю. Куксин, В. В. Стегайлов, А. В. Янилкин

Представлено академиком Ю.А. Осипьяном 06.12.2007 г.

Поступило 18.12.2007 г.

Способность кристалла к пластической деформации обусловлена наличием в кристаллической решетке дислокаций. Движение дислокаций определяет формирование реальной атомной структуры кристаллических тел, кинетику деформации кристаллов под нагрузкой и лежит в основе регулирования многих важных физических свойств твердых тел [1–3].

Известно, что для многих металлов зависимость напряжения течения от скорости деформирования резко усиливается при скорости деформирования, превышающей  $\sim 10^3$ – $10^4$  с<sup>-1</sup>. Такое явление можно интерпретировать как следствие изменения механизма движения дислокаций. При малых скоростях движения дислокации преодолевают препятствия в результате совместного действия приложенного напряжения и тепловых флуктуаций. Вследствие этого увеличение температуры сопровождается понижением предела текучести материалов. Для деформирования с высокой скоростью необходимо приложить более высокие напряжения. При скорости деформирования больше некоторой пороговой ( $\sim 10^4$  с<sup>-1</sup> для чистых металлов) действующие напряжения оказываются достаточными для обеспечения динамического преодоления препятствий без дополнительного вклада тепловых флуктуаций. При этом доминирующим механизмом торможения дислокаций становится перекачка энергии дислокации в колебания кристаллической решетки или, в зависимости от температуры, в электронную подсистему. В отличие от области термофлуктуационной подвижности скорость дислокаций в динамической области падает с температурой в соответствии с увеличением плотности газа элементарных возбуждений. Поэтому при очень высоких скоростях деформирования для некото-

рых материалов наблюдается возрастание (аномальное) напряжения течения с увеличением температуры [1].

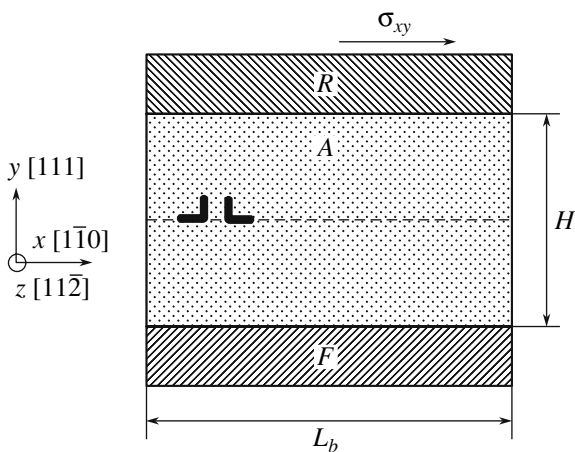
В представленной работе сопоставляются результаты моделирования с величинами динамического предела текучести монокристаллического алюминия из ударно-волновых экспериментов, являющихся мощным методом изучения свойств вещества при динамических нагрузках с хорошо контролируемыми условиями нагружения. Поведение материалов при высокоскоростном деформировании в ударно-волновых экспериментах весьма разнообразно, что проявляется как в ходе температурной зависимости предела текучести, так и при исследовании характера деформации в сохраненных образцах [1, 4].

### МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

На сегодняшний момент предложено три варианта молекулярно-динамических моделей (с разными граничными условиями), позволяющих изучать подвижность единичных дислокаций [5]. В наших расчетах за основу был взят вариант модели, предложенный в работе [6], где периодические граничные условия применяют не только вдоль оси дислокации, но и вдоль направления вектора Бюргера дислокации  $\mathbf{b}$ . В этом случае систему можно представить как массив дислокаций, периодически повторяющихся в пространстве.

На рисунке 1 представлена схема расчетной ячейки, соответствующая этой модели. Оси ориентированы соответственно одной из систем скольжения, типичной для ГЦК-решетки, какой обладает алюминий, а именно  $[1\bar{1}0]$  (111). Вектор Бюргера полной краевой дислокации, обеспечивающей такое скольжение,  $\mathbf{b} = [1\bar{1}0] \frac{a}{2}$  (направление совпадает с осью  $x$ ). Скольжение дислокации происходит в плоскости  $xz$ , т.е. (111). Линия краевой дислокации совпадает с осью  $z$ . Периодические граничные условия действуют вдоль осей  $x$  и  $z$ . Подвижные частицы расчетной ячейки составляют блок  $A$  (размер поперечного сечения  $L_b \times H$ ). Для созда-

Объединенный институт высоких температур  
Российской Академии наук, Москва  
Московский физико-технический институт  
(государственный университет),  
Долгопрудный Московской обл.



**Рис. 1.** Схема модели для расчета поведения дислокации в ГЦК-кристалле под действием сдвига:  $A$  – часть со свободными атомами.  $F$  – область с фиксированными атомами.  $R$  – область атомов в виде абсолютно твердого тела, которая движется в направлении оси  $x$  с заданной скоростью либо под действием заданной внешней силы.

ния сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  используются несколько крайних атомных слоев, каждый из которых состоит из частиц, неподвижных друг относительно друга. Положение трех атомных слоев у нижней границы ( $F$ ) фиксируется на месте, в то время как слои у верхней границы ( $R$ ) двигаются вдоль оси  $x$  под действием заданной внешней силы  $F_x$  либо с постоянной заданной скоростью  $v_x$ . Таким образом, в первом случае непосредственно контролируется сдвиговое напряжение, во втором – деформация.

Для создания дислокации используется следующая процедура:

в идеальной кристаллической структуре удаляются две соседних атомных полуплоскости ( $1\bar{1}0$ );

при небольшом сжатии кристалла происходит сближение атомных плоскостей, находящихся по разные стороны от места выреза, координаты атомов по осям  $y$  и  $z$  при этом фиксируются (т.е. движение атомов происходит вдоль оси  $x$ );

снятие ограничения на движение вдоль оси  $x$  для частиц блока  $A$ , “замораживание” частиц в блоках  $R$  и  $F$ , релаксация образовавшейся структуры методом минимизации потенциальной энергии;

релаксация с выводом на заданные температуру и давление.

Отметим важность третьего этапа описанной процедуры, поскольку на нем происходит процесс расщепления полной дислокации, энергетически менее выгодной для ГЦК-решетки, на две частичные краевые дислокации:

$$\frac{a}{2}[1\bar{1}0] \rightarrow \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[1\bar{2}1]. \quad (1)$$

Поскольку атомы в ядре дислокации, а также в промежутке между разбежавшимися частичными дислокациями образуют дефекты в упаковке ГЦК-решетки, то их можно успешно выделять на основании параметров, характеризующих ближайшее окружение частицы. Анализ движения дислокаций проводится на основании расчета координационного числа  $K_i$  и параметра (локального) центральной симметрии для каждого атома  $CS_i$  [7]. Результатом подобного расчета является положение ядер двух частичных дислокаций на оси  $x$  в зависимости от времени.

При молекулярно-динамическом моделировании использовался потенциал межчастичного взаимодействия [8], разработанный на основе метода погруженного атома (EAM – embedded atom method) для описания свойств алюминия. На первом этапе было проведено его сопоставление с двумя другими потенциалами, часто используемыми в современных расчетах: [9] и [10]. Все эти потенциалы достаточно точно воспроизводят упругие модули материала, известные из экспериментов.

#### ДВИЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В НЕДЕФОРМИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ

Параметром, важным при моделировании движения дислокаций, является равновесное расстояние между частичными дислокациями  $r_{eq}$ . Оно определяется равнодействием двух сил: упругой

отталкивающей силы  $\sim \frac{\mu b^2}{r}$  и силы притяжения

( $\gamma$  на единицу длины дислокации), связанной с увеличением энергии при увеличении размера дефектной области между дислокациями. Таким образом, равновесное расстояние между частичными

дислокациями  $r_{eq} \sim \frac{\mu b^2}{\gamma}$  (см., например, [11, 12]).

Расчеты статическими методами (минимизация потенциальной энергии системы) показывают, что равновесное расстояние между частичными дислокациями составляет 1.5 нм для двух рассмотренных потенциалов [8] и [10]. Такое значение близко к данным экспериментов и расчетов из первых принципов (значение варьируется от 0.3 до 4 нм; подробнее см. [11]). При использовании потенциала [10] равновесное расстояние оказывается существенно больше и сравнимо с размером ячейки. Несмотря на то, что значение модуля сдвига для потенциала [10] меньше, расстояние между дислокациями оказывается для него больше. Это объясняется чрезвычайно низкой энергией образования дефектной структуры  $\gamma$ , которая не принималась во внимание при разработке этого потенциала. Поскольку данный параметр представляется важным при рассмотрении подвижности дислокаций и их взаимодействия с дефектами в

ГЦК-кристалле, в исследованиях используется потенциал [8].

При моделировании недеформированного монокристалла при конечной температуре наблюдаются колебания ядер частичных дислокаций. Общее движение дислокаций можно представить в виде трех характерных типов колебаний: поперечные колебания каждой из частичных дислокаций (изгибы дислокационной линии); колебания расстояния между ядрами частичных дислокаций; колебания общего центра масс двух дислокаций. Амплитуда колебаний всех типов определяется температурой.

Колебания расстояния между частичными дислокациями (второго типа) происходят около значения 1.5 нм в диапазоне 1–3 нм. Как уже было отмечено, равновесное расстояние и характерная частота определяются силами упругого взаимодействия частичных дислокаций и силой поверхностного натяжения между ними, зависящей от энергии дефекта упаковки. Пульсирующее движение такого типа наблюдалось при молекулярно-динамическом моделировании частичных винтовых дислокаций в ГЦК-кристаллах и получило название “дыхание дислокаций” [13].

### КОЭФФИЦИЕНТ ТОРМОЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ

Подвижность дислокаций в зависимости от сдвигового напряжения удобно изучать, прикладывая внешнюю силу к блоку атомов  $R$ , в то время как блок  $F$  остается зафиксированным. Величина сдвигающей силы  $F_x$  определяется значением заданного напряжения  $\sigma_{xy}$  и площадью поверхности  $S_{xz}$ , к которой она прикладывается:  $F_x = \sigma_{xy} S_{xz}$ . В результате кристалл подвергается упругой деформации. Мгновенная величина напряжения, рассчитываемая из теоремы вириала, при этом колеблется около среднего заданного значения  $\sigma_{xy}$ . При малых напряжениях дислокация может оставаться на месте либо совершать нерегулярные движения в ту или иную сторону. По достижении критического значения напряжения ее перемещения становятся упорядоченными, начинается перемещение с постоянной скоростью, зависящей от прикладываемой сдвиговой силы и температуры. Колебания мгновенной величины напряжения, упомянутые выше, не сказываются на скорости дислокации.

Измеренные нами зависимости скорости дислокации  $v$  от сдвигового напряжения  $\sigma$  для нескольких температур, вплоть до температуры плавления, представлены на рис. 2. Четко выделяются два режима (особенно при низких температурах): линейный в области низких значений напряжения и асимптотического приближения скорости дислокации к поперечной скорости зву-

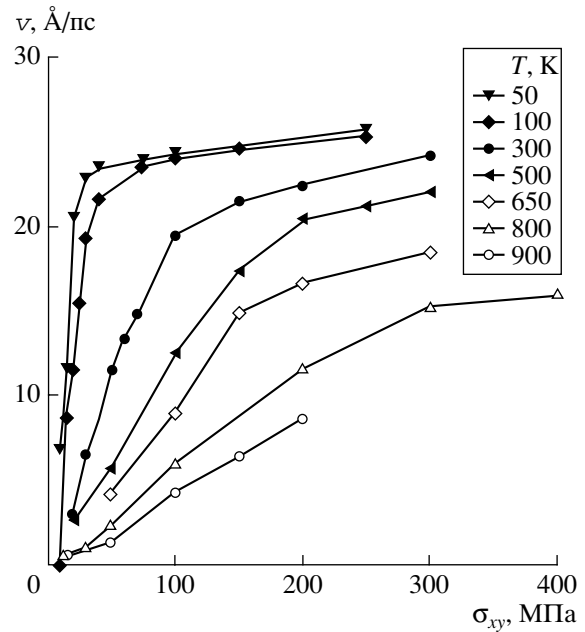


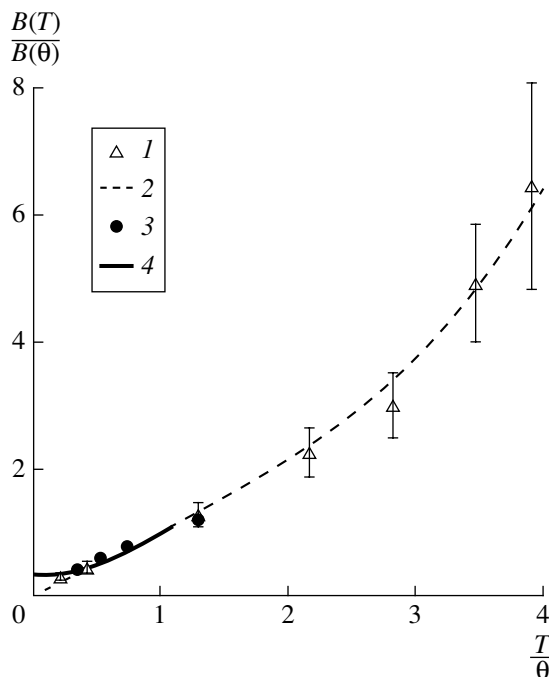
Рис. 2. Зависимость скорости движения дислокации  $v$  от прикладываемого сдвигового напряжения  $\sigma_{xy}$ . Представлены результаты для различных температур.

ка. Во всем исследованном диапазоне увеличение температуры приводит к уменьшению скорости дислокации. Таким образом, движение дислокаций не требует термоактивации, наоборот, имеет место динамический режим с фоновым трением дислокаций. Движение лимитируется перекачкой энергии от дислокации к элементарным возбуждениям в кристалле. Линейный участок зависимости принято характеризовать коэффициентом динамического торможения дислокации  $B$ :

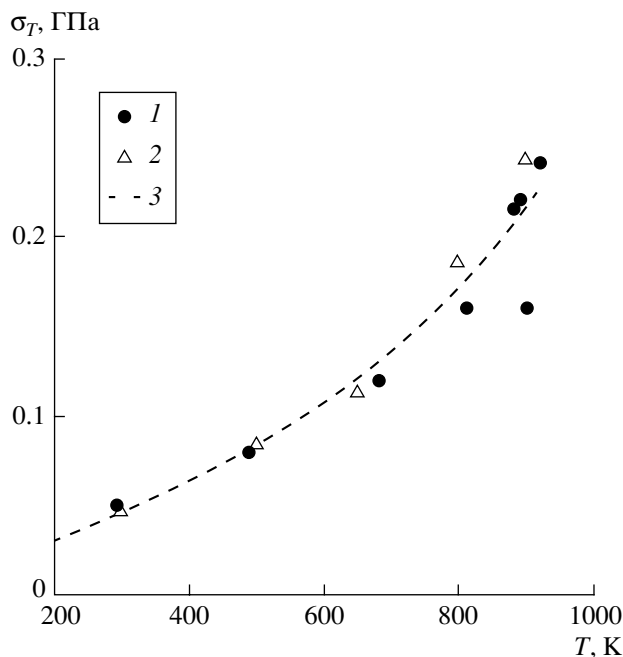
$$\sigma b = Bv, \quad (2)$$

где  $b \approx 2 \text{ \AA}$  – величина вектора Бюргерса дислокации.

На основании полученных здесь методом молекулярной динамики данных была определена температурная зависимость коэффициента торможения  $B(T)$ . В виде, обезразмеренном на температуру  $\theta$  (порядка дебаевской, подробнее см. [2]) и соответствующее значение коэффициента  $B(\theta)$ , она представлена на рис. 3. Для алюминия использовано значение  $\theta = 230 \text{ К}$ . Для сравнения приведены экспериментальные данные, взятые из обзора [2]. Абсолютное значение коэффициента торможения дислокации при 300 К, определенное из обработки молекулярно-динамических расчетов, составило приблизительно  $1.4 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$ , что близко к экспериментальным значениям. По оценкам различных экспериментов оно варьируется от  $0.5 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$  (затухание ультразвука; см. [14]) и  $2.6 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$  (подвижность дислокаций;



**Рис. 3.** Зависимость коэффициента динамического торможения дислокации от температуры для кристалла алюминия. Значения температуры и коэффициента обезразмерены на температуру  $\theta = 230$  К и величину  $B(\theta)$ . 1 – молекулярная динамика, 2 – аппроксимация данных молекулярной динамики по формуле (3), 3 – эксперимент [15], 4 – эксперимент [14].



**Рис. 4.** Зависимость динамического предела текучести монокристаллического алюминия от температуры. 1 – эксперимент [1], 2 – соотношение (4) при  $b = 2$  Å,  $\dot{\epsilon} = 10^6$  с $^{-1}$ ,  $\rho_m = 7 \cdot 10^8$  см $^{-2}$  и значениях  $B(T)$  из молекулярной динамики, 3 – то же, что и 2, но при аппроксимации  $B(T)$  по формуле (3) и  $\rho_m = 7.5 \cdot 10^8$  см $^{-2}$ .

см. [15]) до  $17 \cdot 10^{-5}$  Па · с (затухание ультразвука; см. обзор [2]).

В области умеренных температур зависимость практически линейная. Такой ход кривой  $B(T)$  описывается в рамках существующих теорий фоновонного трения [2]. С ростом температуры сказываются отклонения от линейного закона, хорошо описываемые полиномом третьей или четвертой степени, например:

$$\frac{B(T)}{B(\theta)} = \frac{T}{\theta} + 0.0095 \left( \frac{T}{\theta} \right)^4. \quad (3)$$

#### ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ДИНАМИЧЕСКОГО ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ

Величину напряжения течения при высокоскоростном нагружении можно определить, если считать, что скорость пластического деформирования  $\dot{\epsilon}$  определяется подвижностью дислокаций:  $\dot{\epsilon} = \rho_m b v$ . Будем считать, что плотность подвижных дислокаций  $\rho_m$  постоянна в экспериментах, не зависит от температуры и условий деформирования. Тогда величина динамического предела текучести как функция температуры определяется температурной за-

висимостью коэффициента торможения дислокаций  $B(T)$  в соответствии с формулой

$$\sigma_T(T) = \frac{\dot{\epsilon}}{\rho_m b^2} B(T). \quad (4)$$

Полученные таким образом значения можно сопоставить с данными о динамическом пределе текучести монокристаллического алюминия, полученными из ударно-волнового эксперимента [1], где скорости деформирования составляют приблизительно  $\dot{\epsilon} = 10^6$  с $^{-1}$  (см. рис. 4). Точные значения плотности дислокаций в условиях ударно-волнового сжатия не известны, однако видно, что экспериментально полученная температурная зависимость хорошо описывается зависимостью динамического коэффициента торможения дислокаций от температуры  $B(T)$ , если величину плотности дислокаций принять равной  $\rho_m \approx 7 \cdot 10^8$  см $^{-2}$ . Различие на один–два порядка в сравнении с характерной плотностью подвижных дислокаций в монокристаллическом алюминии при нормальных условиях ( $10^6$ – $10^7$  см $^{-2}$  по данным из [15]) можно объяснить возрастанием плотности дислокаций при сжатии материала в ударной волне. Из формулы (2) заключаем, что измеренные в эксперименте [1] величины предела текучести обеспечиваются при скорости движения дислокаций

$v \sim 700$  м/с, соответствующей динамическому режиму торможения (см. рис. 2).

Таким образом, построена молекулярно-динамическая модель движения краевой дислокации в монокристалле. В модели алюминия получены зависимости скорости краевой диссоциировавшей дислокации от сдвигового напряжения при различных температурах. С увеличением прикладываемого сдвигового напряжения достигается предельная скорость движения дислокаций, близкая к скорости распространения упругих сдвиговых возмущений. Определена температурная зависимость коэффициента динамического торможения, соответствующая при малых температурах имеющимся экспериментальным данным и теоретическим представлениям. С приближением к температуре плавления полученная зависимость коэффициента динамического торможения дислокаций существенно отличается от линейной. Результаты согласуются с экспериментальными данными по температурной зависимости предела текучести алюминия при высокоскоростной деформации и могут служить для определения плотности дислокаций за фронтом ударной волны.

Расчеты выполнены в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН и на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ (ГУ).

Авторы выражают признательность Г.И. Канелю за полезные обсуждения и интерес к данной работе.

А.В.Я. благодарит за поддержку Фонд некоммерческих программ “Династия”.

Работа поддержана грантами РФФИ 05-08-65423, программ фундаментальных исследований РАН “Исследование вещества в экстремальных условиях” и “Квантовая макрофизика”, аналити-

ческой ведомственной целевой программы “Развитие научного потенциала высшей школы (2006–2008 гг.)” “Компьютерное моделирование металлов в области фазовых переходов и экстремальных условиях”.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Канель Г.И., Фортон В.Е., Разоренов С.В. // УФН. 2007. Т. 177. № 8. С. 809.
2. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. // УФН. 1975. Т. 115. № 1. С. 3.
3. Осипьян Ю.А., Петренко В.Ф. // ЖЭТФ 1972. Т. 63. № 5(11). С. 1735–1744.
4. Добромьслов А.В., Козлов Е.А., Литвинов Б.В., Талуц Н.И. // ДАН. 2007. Т. 415. № 2. С. 185.
5. Osetsky Yu.N., Bacon D.J. // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2003. № 11. P. 427.
6. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. // Mater. Sci. Rep. 1992. № 9. P. 251.
7. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 11085.
8. Liu X.-Y., Ercolessi F., Adams J.B. // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2004. № 12. P. 665.
9. Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 3393.
10. Cai J., Ye Y.Y. // Phys. Rev. B. 1996. № 54. P. 8398.
11. Srinivasan S.G., Liao X.Z., Baskes M.I. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. P. 125502.
12. Хурт Дж., Ломе И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972.
13. Mordehai D., Ashkenazy Y., Kelson I., Makov G. // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. P. 024112.
14. Hikata A., Johnson R.A., Elbaum C. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. № 12. P. 4856.
15. Gorman J.A., Wood D.S., Vreeland T., Jr. // J. Appl. Phys. 1969. V. 40. P. 833, 903.