УДК 538.911

Брюханов И.А., Ларин А.В.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАРОЖДЕНИЯ И РАЗВИТИЯ ПЕТЕЛЬ ЧАСТИЧНЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В МЕТАЛЛАХ С ГЦК РЕШЕТКОЙ

Методом молекулярной динамики исследуются механизмы зарождения и развития петель частичных дислокаций при сдвиге в алюминии. Показано, что зарождению дислокации предшествует образование дефектного кластера, в котором атомы сдвинуты примерно на половину величины вектора Бюргерса частичной дислокации. Обнаружено, что развитие петли частичной дислокации может происходить по трем сценариям: она либо схлопывается, либо из нее формируется полная дислокация, либо внутри нее образуется двойник.

Ключевые слова: молекулярная динамика, дислокации, дефект упаковки, двойник, алюминиевые сплавы.

Molecular dynamic simulation was applied to study the mechanisms of nucleation and propagation of partial dislocation loop in aluminum. It was shown that dislocation nucleation was preceded by the formation of defect cluster consisted of atoms in two nearest planes sheared by approximately a half of Burgers vectors of partial dislocation. It was discovered that the propagation of partial dislocation loop can realize three different scenarios: collapsing, the formation of the full dislocation loop or producing twins in its internal area.

Keywords: molecular dynamics, dislocations, stacking faults, twins, aluminum alloys.

Введение

При интенсивном воздействии посредством ударно-волнового нагружения [1, 2] в кристаллическом материале происходят изменения дефектной подсистемы, за счет которой развивается пластическая деформация. Известно, что ее основными механизмами является движение [3], зарождение и размножение дислокаций [4]. Изучение кинетики этих дислокационных процессов важно для описания эволюции во времени дефектной структуры материала при динамическом нагружении.

Метод молекулярной динамики позволяет исследовать некоторые процессы пластической деформации, среди которых, например, движение одиночных дислокаций [5, 6], торможение дислокаций примесными атомами [7], зарождение дислокаций [8, 9] и размножение на источнике Франка-Рида [10].

В работах по исследованию структуры ударной волны в металлах [1, 2] установлено, что на фронте ударной волны происходит интенсивное зарождение и распространение дислокационных петель, из-за чего плотность дислокаций может повышаться на два-три порядка. Кроме того, в экспериментах на меди [2] было обнаружено, что когда давление ударника пре-

© Брюханов И.А., Ларин А.В., 2016

вышает некоторое пороговое значение, то деформация реализуется через двойникование (twinning). Поэтому исследование различных механизмов двойникования является актуальной задачей.

Данная работа посвящена изучению атомного механизма зарождения петли частичной дислокации в алюминии и исследованию механизмов ее дальнейшего распространения с помощью метода молекулярной динамики.

1. Моделирование зарождения и развития петель частичных дислокаций

Для исследования процесса зарождения дислокаций рассматривался монокристалл алюминия с направлениями осей $[11\overline{2}]$, [111] и $[1\overline{1}0]$. При этом форма расчетной ячейки выбиралась близкой к кубической. По всем трем направлениям задавались периодические граничные условия для исключения влияния свободной поверхности на процесс зарождения. Как показано в [8], влияние размера системы на процесс гомогенного зарождения несущественно, поэтому рассматривалась только система, состоящая из N = 311040 атомов. Размер этой

системы приближенно был равен 17х17х17 нм³.

Сначала система приводилась в состояние равновесия при заданной температуре и нулевом давлении в баростате Паринелло и Рахмана [11]. Затем система подвергалась однократному сдвигу вдоль направления вектора частичной дислокации в гранецентрированной кубической (ГЦК) решетке алюминия $b = a/6[11\overline{2}]$. После этого система выводилась в том же баростате при заданной температуре в равновесное состояние таким образом, чтобы только компонента σ_{xy} была отлична от нуля. Далее баростат отключался и ожидался момент времени, когда произойдет зарождение дислокации в плоскости (111). Изучалось поведение системы при температурах в диапазоне от 10 до 700 К.

Так как размер системы, выбранной для моделирования зарождения дислокаций, не позволял нам в полной мере изучить характер ее дальнейшего распространения, то для моделирования их развития использовалась система с большим размером вдоль направления векторов распространения петли $[11\overline{2}]$ и $[1\overline{1}0]$ -122х16х106 нм³. Эта система сначала выводилась на равновесие при заданной температуре и нулевом давлении. Так как моделирование зарождения дислокации из предыдущего пункта подразумевает моделирование лишь при сдвиговых напряжениях, близких к критическим, то для исследования влияния сдвигового напряжения на характер развития петли, петля создавалась «вручную» посредством сдвига атомов, лежащих в двух соседних плоскостях (111). Затем система сдвигалась вдоль вектора [112] и динамика развития петли отслеживалась с использованием параметра центросимметрии [12].

Использовался потенциал взаимодействия атомов для систем Al-Cu из работы [13], который является обобщением традиционного потенциала погруженного атома (EAM) с учетом угловых взаимодействий (angular dependent potential). Все МД расчеты были проведены в пакете программ LAMMPS [14].

2. Механизм зарождения дислокаций

Механизм зарождения дислокаций в твердых растворах алюминия с медью был рассмотрен авторами в работе [9], и он не зависит от температуры. В метастабильном состоянии равновесия атомы системы совершали колебательные движения около своих положений в решетке. При этом из-за приложенного сдвигового напряжения атомы, лежащие в соседних плоскостях скольжения (111), объединялись в дефектные кластеры, в которых суммарная величина сдвига атомов составляла порядка половины величины вектора Бюргерса. Образовавшиеся в гомогенном объеме кристалла дефектные кластеры могли сохранять форму не более 1 пс, после чего схлопывались (рис.1а-1б). Процессы образования таких кластеров проходили по всему объему системы до тех пор, пока не образовывался такой кластер, который не схлопывался, а увеличивался в размерах (рис.2*a*). Причем, сначала он удлинялся в направлении $[11\overline{2}]$ за 0.1 пс (рис.26), а затем сжимался. После достижения некоторого размера, который составляет примерно 2.5 нм в направлениях $[11\overline{2}]$ и $[1\overline{1}0]$, внутри кластера происходил дальнейший сдвиг атомов, который формировал петлю частичной дислокации как область атомов, ограничивающих дефект упаковки (ДУ) (рис.2в). Затем петля начинала расширяться в обе стороны (рис.2г).



Рис.1. Образование (*a*) и схлопывание (б) дефектных кластеров в плоскости (111) в моменты времени 20.5 (*a*) и 20.6 пс (б) при температуре 300 К. Показаны атомы, находящиеся в двух соседних плоскостях (111); область дефектных кластеров выделена в круг и закрашена в тех местах, где они присутствуют



Рис.2. Зарождение и развитие дислокационной петли при температуре 300 К в моменты времени 25.6 (*a*), 26.0 (*б*), 26.3 (*в*) и 26.5 (*г*) пс. Светло-серым выделены атомы дефектного кластера и ядра частичной дислокации, темно-серым – атомы дефекта упаковки внутри петли

Интерпретация найденного механизма может быть сделана на основе энергетического профиля ДУ в алюминии, рассчитанного в данной работе для используемого потенциала на рис.3 аналогично работе [15]. Перед минимумом энергии при величине сдвига, равной вектору Бюргерса, соответствующему энергии стабильного ДУ, имеется максимум, положение которого соответствует примерно половине величины вектора Бюргерса. Для того чтобы два ближайших слоя атомов (111) сформировали дефект упаковки, им сначала необходимо преодолеть этот максимум, образовав сдвиг на половину нужной величины. Однако, так как это состояние является неустойчивым, то в динамике атомы либо возвращаются в исходное положение в решетке, либо продолжают сдвигаться дальше до достижения устойчивого минимума ДУ.



Рис.3. Зависимость энергии дефекта упаковки от смещения атомов вдоль направления $[11\overline{2}]$ для алюминия с использованием потенциала ADP [12]. Темным крестиком отмечено положение устойчивой энергии дефекта упаковки, а светлым – положение неустойчивой энергии дефекта упаковки

3. Механизмы распространения петли частичной дислокации

Когда в системе напряжение было недостаточно велико для энергетической стабильности дислокационной петли, то петля схлопывалась. Стоит отметить, что данный результат означает, что дислокационные петли, которые стабильны при данном напряжении, должны иметь больший радиус. Время, за которое происходило схлопывание петли, зависело от ее размера и сдвигового напряжения в системе. В наших расчетах, например, при напряжении 0.7 ГПа и радиусе петли 40 нм, время схлопывания петли достигало 40 пс.

Когда напряжение в системе было достаточно для того, чтобы дислокация не схлопывалась, при недостаточно больших напряжениях частичная дислокация трансформировалась в полную дислокацию (рис.4). Сначала частичдислокация начинала увеличиваться ная (рис.4а), но потом в некоторый момент внутри нее происходил сдвиг атомов (рис.4б), который возвращал атомы внутри петли в положение идеальной решетки и с течением времени формировал из неё структуру, похожую на полную дислокацию (рис.4в). Стоит отметить, что похожая физическая картина наблюдалась при моделировании зарождения дислокации с границ зерен методом фазового поля [16]. Авторы этой работы обнаружили, что зародившаяся на границе зерен частичная дислокация увеличивается до некоторого момента, пока не трансформируется в полную. Таким образом, они попытались объяснить переход от механизма скольжения дислокаций к двойникованию при уменьшении размера зерна.

В случаях более высоких сдвиговых напряжений (более 1.4 ГПа) изначально созданная дислокационная петля сразу же начинала расширяться, однако, по достижении некоторого размера в внутри неё зарождался сдвиг атомов, выходящий за две ближайшие плоскости скольжения (111). Сначала образовывался так называемый внешний дефект упаковки, а затем, двойник. Фронт этого сдвига догонял саму петлю, и петля с течением времени трансформировалась в двойник толщиной четыре атомных слоя. Если напряжение было достаточно большим, то этот сдвиг мог также захватывать и другие соседние плоскости (111), и тогда толщина двойника увеличивалась. Этот результат означает, что двойникование в процессе динамического нагружения ГЦК металлов может происходить в результате зарождения и последующего движения частичных дислокаций.



Рис.4. Образование петли полной дислокации из петли частичной дислокации в моменты времени 10.5 (*a*), 16.2 (*б*), 20.5 (*в*) пс при температуре 300 К и напряжении 0.9 ГПа. Показаны атомы, значение параметра центросимметрии [14] которых превышает 3.5

Заключение

В данной работе на основе молекулярнодинамических расчетов исследованы механизмы образования и распространения петель частичных дислокаций в металлах с гранеценетрированной решеткой на примере алюминия. Проведенные исследования показали, что кинетика зарождения дислокаций тесно связана с профилем энергии дефекта упаковки и может быть интерпретирована на её основе. Из-за того, что в зависимости энергии дефекта упаковки от смещения атомов имеется неустойчивая энергии дефекта упаковки, которая предшествует устойчивому состоянию с энергией дефекта упаковки, образованию частичной дислокации предшествует формирование дефектного кластера.

Исследование механизмов распространения частичной дислокации показали, что в зависимости от приложенного сдвигового напряжения, петля может либо исчезать, либо образовывать полную дислокацию, либо зарождать двойник.

Результаты, полученные в работе, могут быть использованы для построения моделей пластического деформирования металлов, учитывающих их дефектную подсистему.

Все расчеты проведены на суперкомпьютерном комплексе «Ломоносов-1» МГУ [17].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №16-31-00478 мол_а.

Список используемой литературы

1. Zaretsky E.B., Kanel G.I. Effect of temperature, strain, and strain rate on the flow stress of aluminum under shock-wave compression // Journal of Applied Physics. 2012. V.112. No.7. P. 073504.

2. Meyers M.A. et al. Laser-induced shock compression of monocrystalline copper: characterization and analysis // Acta Materialia. 2003. V.51. No.5. P. 1211-1228.

3. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Динамическое торможение дислокаций // Успехи физических наук. 1975. т.115. №1. С. 1.

4. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. Атомиздат, 1972. 600 с.

5. Куксин А. Ю., Янилкин А. В. Атомистическое моделирование движения дислокаций в металлах в условиях фононного трения // Физика твердого тела. 2013. т.55. №5. С. 931-939.

6. Olmsted D.L. et al. Atomistic simulations of dislocation mobility in Al, Ni and Al/Mg alloys // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2005. V.13. No.3. P. 371. 7. Yanilkin A.V. et al. Dynamics and kinetics of dislocations in Al and Al–Cu alloy under dynamic loading // International Journal of Plasticity. 2014. V.55. P. 94-107.

8. Норман Г.Э., Янилкин А.В. Гомогенное зарождение дислокаций // Физика твердого тела. 2011. т.53. №8. С. 1536-1541.

9. Брюханов И.А., Ковалев В.Л., Ларин А.В. Зарождение дислокаций в сплавах алюминия с медью // Физика твердого тела. 2015. т.57. №9. С. 1761-1771.

10. Xu S. et al. An analysis of key characteristics of the Frank-Read source process in FCC metals // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2016. T.96. C. 460-476.

11. Parrinello M., Rahman A. Crystal structure and pair potentials: A molecular-dynamics study // Physical Review Letters. 1980. V.45. No.14. P. 1196.

12. Apostol F., Mishin Y. Interatomic potential for the Al-Cu system //Physical Review B. 2011. V.83. No.5. P. 054116.

13. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics //Journal of computational physics. 1995. V.117. No.1. P. 1-19.

14. Zimmerman J.A. et al. Surface step effects on nanoindentation // Physical Review Letters. 2001. V.87. No.16. P. 165507.

15. Zimmerman J.A., Gao H., Abraham F.F. Generalized stacking fault energies for embedded atom FCC metals // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2000. V.8. No.2. P. 103.

16. Hunter A., Beyerlein I. J. Stacking fault emission from grain boundaries: material dependencies and grain size effects // Materials Science and Engineering: A. 2014. V.600. P. 200-210.

17. Voevodin V.V. et al. Practice of "Lomonosov" supercomputer // Open Systems J. 2012. V.7. P. 36-39.

Московский государственный университет имени Ломоносова, Москва, Россия.

Подписано в печать 24.11.16.

Сведения об авторах

Брюханов Илья Александрович, н.с. МГУ, ibryukhanov@gmail.com Ларин Александр Васильевич, к.х.н., в.н.с. МГУ, Larin@phys.chem.msu.ru