DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2019.04.014

УДК 538.911

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СКОЛЬЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИИ В ГЦК МЕТАЛЛЕ

Г.М. Полетаев^{1†}, И.В. Зоря², М.Д. Старостенков¹

[†]gmpoletaev@mail.ru

¹Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия ²Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия

Методом молекулярной динамики проведено исследование скольжения краевой и винтовой дислокаций в ГЦК металле в зависимости от температуры и скорости сдвига. Исследования выполнены на примере никеля. Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичным потенциалом Клери-Розато, построенным в рамках модели сильной связи. Инициирование образования и движения дислокации проводилось за счет сдвига двух частей торца расчетного блока в разные стороны. Полная дислокация появлялась при моделировании сразу в виде расщепленной на пару частичных дислокаций Шокли, разделенных дефектом упаковки. Расстояние между частичными дислокациями составляло несколько нанометров. При высоких скоростях сдвига оно уменьшалось. При моделировании инициации и движения винтовой дислокации было обнаружено, что она, в отличие от краевой, сравнительно легко может менять плоскость скольжения с (111) на ($\overline{111}$), что объясняется, очевидно, сходством природы ее распространения с распространением поперечной волны. Для никеля получены зависимости скорости скольжения краевой и винтовой дислокаций в зависимости от скорости сдвига и температуры. Скорость скольжения краевой дислокации выше, чем винтовой, что объясняется отличием скорости распространения продольной и поперечной волн. С ростом температуры скорость скольжения дислокаций снижается. С ростом скорости сдвига скорость дислокации возрастает до определенного предела, зависящего от скорости звука в металле. Сначала, примерно до 100 м/с, скорость дислокации с ростом скорости сдвига растет почти линейно, но при приближении скорости дислокации к своему пределу, график становится все более горизонтальным

Ключевые слова: молекулярная динамика, металл, дислокация, скорость дислокации, скорость сдвига.

MOLECULAR DYNAMICS MODELING OF DISLOCATION SLIDE IN FCC METAL

G.M. Poletaev^{1†}, I.V. Zorya², M.D. Starostenkov¹

[†]gmpoletaev@mail.ru

¹I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia ²Siberian State Industrial University, Kirova Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia

The molecular dynamics method was used to study of the slide of edge and screw dislocations in fcc metal depending on temperature and shear rate. The study was performed using nickel as an example. The interactions of metal atoms with each other were described by the Cleary-Rosato multiparticle potential constructed in the framework of the tight-binding model. The initiation of the dislocation formation and movement was carried out by shearing the two parts of the end face of the calculation cell in different directions. During the simulation, a perfect dislocation appeared immediately in the form of a pair of partial Shockley dislocations separated by a stacking fault. The distance between partial dislocations was several nanometers. At high shear rates, it decreased. When modeling the initiation and motion of the screw dislocation, it was found that, in contrast to the edge dislocation, it can relatively easily change the slip plane from (111) to $(\overline{111})$, which is obviously explained by the similarity of the nature of its propagation with the propagation of a shear wave. For nickel, the dependences of the sliding rate of the edge and screw one, which is explained by the difference in the propagation velocity of the longitudinal and transverse waves. With increasing temperature, the dislocation slip rate decreases. With an increase in the shear rate, the dislocation rate increases almost linearly with an increase in the shear rate, but as the dislocation rate approaches its limit, the graph becomes more horizontal. **Keywords:** molecular dynamics, metal, dislocation, dislocation rate, shear rate.

Введение

Образование, движение и взаимодействие дислокаций друг с другом и другими дефектами являются основными вопросами, поиск ответов на которые необходим для развития представлений о механизмах пластической деформации кристаллических материалов. Многообразие кристаллических систем, систем скольжения и типов дислокаций, а также вариантов взаимодействия дислокаций с другими дефектами порождает сложность и комплексность данного явления.

В кристаллах с ГЦК решеткой, к которым относится ряд металлов, преимущественной является система скольжения {111}<110> [1, 2]. Плоскости {111} – наиболее плотноупакованные, в этих же плоскостях образуются дефекты упаковки. Вектор Бюргерса полной дислокации в этом случае 1/2<110>. Но такая дислокации, как правило, расщепляется на две частичные дислокации с векторами Бюргерса 1/6<112>, между которыми формируется дефект упаковки.

Дислокациям в металлах посвящено много работ, в том числе выполненных с помощью компьютерного моделирования [3-7]. Помимо сложных вопросов взаимодействия дислокаций с различными дефектами и их движения в условиях наличия примесей, внимание в них часто обращено и на относительно простые вопросы: например, зависимость скорости скольжения дислокации от температуры и скорости деформирования [5, 8]. С ростом скорости деформирования скорость дислокаций, как известно, сначала растет, а затем достигает некоторого предела, который, как правило, меньше скорости звука в данном материале. Причем разные авторы приводят разные значения этого предела в отношении к скорости звука [1, 2, 5, 8]. С ростом температуры, как отмечает большинство исследователей, скорость скольжения дислокаций снижается [1, 5, 8]. В качестве причин этого снижения называют фононное рассеяние, изменение модуля сдвига с температурой и т.д. Для учета факторов, тормозящих дислокацию, введен общий коэффициент сопротивления (drag coefficient) [5, 8], для которого продолжается поиск как численных значений, так и эмпирических выражений.

Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики скорости скольжения дислокаций в ГЦК металле в зависимости от температуры и скорости сдвига. В качестве металла с ГЦК решеткой в настоящей работе был выбран никель.

1. Описание модели

Для описания межатомных взаимодействий в никеле использовался многочастичный потенциал Клери-Розато [9], построенный в приближении сильной связи. Данный потенциал неоднократно использовался в молекулярнодинамических моделях и прошел апробацию по большому числу характеристик [10-19]. Опыт его применения показывает, что с его помощью удается описать разнообразные свойства металлов и сплавов. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 фс. Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе-Гувера.

Для моделирования движущейся дислокации был создан прямоугольный расчетный блок, содержащий около 30000 атомов (рис.1), с ориентацией осей: Х – [110], Y – [112], Z – [111]. Плоскость ХҮ (рис.1) в данном случае соответствует плоскости скольжения дислокации (111).

Для инициации движения дислокации создавался сдвиг от торца расчетного блока. На рис.1а изображена схема создания движущейся полной краевой дислокации $\frac{1}{2}$ [101](111), а на рис.16 – винтовой дислокации $\frac{1}{2}[\overline{1}10]$ (111). Заштрихованные области с левого торца перемещались как единое целое вдоль направлений, показанных на рисунке: в случае моделирования краевой дислокации верхняя часть торца смещалась вдоль плотноупакованного направления [101], нижняя – вдоль противоположного направления $[10\overline{1}]$ (рис.1а); в случае винтовой – вдоль направлений $[\overline{1}10]$ (ось X) и $[1\overline{1}0]$. Атомы внутри заштрихованной области в процессе компьютерного моделирования смещались только вдоль указанных направлений с варьируемой скоростью сдвига V₇. Граничные условия с этой стороны, таким образом, были жесткими. Вдоль оси Х, вдоль ядра дислокации, граничные условия задавались периодическими, т.е. имитировалось бесконечное повторение структуры расчетного блока вдоль оси Х. По другим границам мы использовали специальный тип граничных условий – условно жесткий: все атомы в серой области (сверху, снизу и справа) на рис.1 в процессе моделирования имели возможность двигаться только вдоль плоскости XY, движение вдоль оси Z исключалось. Этого было достаточно для удержания, с одной стороны, заданной прямоугольной формы расчетного блока и, с другой стороны, свободного выхода дислокаций за пределы расчетного блока.



Рис.1. Модель дислокации в ГЦК металле: а) краевой, б) винтовой. SF – дефект упаковки

2. Результаты и обсуждение

Верхняя и нижняя часть левого торца расчетного блока смещались относительно друг друга со скоростью сдвига V₇, которая оставалась постоянной в течение компьютерного эксперимента. В некоторый момент времени сдвиг в левой части расчетного блока провоцировал появление дислокации - краевой или винтовой в зависимости от направления сдвига. Полная дислокация появлялась сразу в виде расщепленной на пару частичных дислокаций Шокли, разделенных дефектом упаковки в плоскости (111). Для краевой дислокации реакция расщепления имела вид $\frac{1}{2}[\overline{101}] \rightarrow \frac{1}{6}[\overline{211}] + \frac{1}{6}[\overline{112}],$ для винтовой – $\frac{1}{2}[\overline{1}10] \rightarrow \frac{1}{6}[\overline{1}2\overline{1}] + \frac{1}{6}[\overline{2}11].$ Расстояние между частичными дислокациями определяется, как известно, энергией дефекта упаковки. В настоящей работе оно составляло несколько нанометров (в зависимости от скорости сдвига), что согласуется с результатами моделирования других авторов, например [5-7].

При моделировании инициации и движения винтовой дислокации было замечено, что она, в отличие от краевой, сравнительно легко может менять плоскость скольжения с (111) на ($\overline{11}$). Из-за этой способности винтовой дислокации менять плоскость скольжения, особенно вблизи места инициации, граничные условия были скорректированы: жестко смещаемая область (заштрихованная область на рис.1) была продолжена сверху и снизу расчетного блока на такое расстояние от торца, чтобы исключить образование сдвига в плоскости $\{\overline{111}\}$ на начальной стадии движения винтовой дислокации (рис.2а).

Скорость движения дислокации определялась с помощью реперных точек - 1 и 2 на рис.2а. В процессе движения дислокации выводились два графика временных зависимостей: смещения атомов 1' и 1", находящихся под и над плоскостью скольжения, относительно друг друга в плоскости ХҮ, и смещения атомов 2' и 2", отстоящих дальше вдоль плоскости скольжения на расстоянии L. На рис.26 приведен пример графиков смещения реперных точек 1 и 2 в течение скольжения краевой дислокации в Ni при скорости сдвига 10 м/с и температуре 300 К. Скорость дислокации рассчитывалась как отношение $L/\Delta t$, где Δt – время прохождения дислокации между 1-й и 2-й реперными точками (рис.2б).

С ростом скорости сдвига V_{t} , как известно, средняя скорость дислокации увеличивается. Но это происходит до определенного предела, зависящего от скорости звука в металле [1, 2, 5, 8]. На рис.3 приведены зависимости средней скорости краевой и винтовой дислокаций в Ni от скорости сдвига при температуре 50 К. Сначала, примерно до 100 м/с, скорость дислокации с ростом скорости сдвига растет почти линейно, но при приближении скорости дислокации к своему пределу, график становится все более горизонтальным.



Рис.2. К методу расчета скорости скольжения дислокации: а) реперные точки для определения скорости; б) пример графиков смещения реперных точек 1 и 2 в течение скольжения краевой дислокации в Ni при скорости сдвига 10 м/с и температуре 300 К

Скорость краевой дислокации, как видно из рис.3, выше винтовой, что является известным фактом и объясняется отличием скоростей распространения продольных и поперечных волн в материале [1, 2].



Рис.3. Зависимость скорости краевой и винтовой дислокаций от скорости сдвига в Ni при температуре 50 К. Расстояние между реперными точками 77,3 Å

На рис.3 при скорости сдвига выше примерно 500 м/с зависимости изображены пунктирной линией. Это обусловлено тем, что при таких скоростях, всего лишь в несколько раз меньших скорости звука, деформирование на атомном уровне часто сопровождалось дополнительным дефектообразованием, а при скоростях выше 1000 м/с даже разрушением кристаллической структуры и аморфизацией. При таких высоких скоростях сдвига первые дислокации ненамного опережали сам сдвиг, они двигались очень плотно. При этом расстояние между частичными дислокациями было минимальным. В самом месте инициации, т.е. с левой стороны расчетного блока возникали нарушения структуры и частичная аморфизация. Аморфизация и разрушение кристаллической структуры при высокоинтенсивной деформации является известным фактом и описана во многих работах, например [20-25].

С ростом температуры, согласно различным источникам [1, 2, 5, 8], скорость дислокации снижается. На это влияют фононное рассеяние, изменение модуля сдвига с температурой и т.д. Для учета факторов, тормозящих дислокацию, введен, так называемый, коэффициент сопротивления (drag coefficient) [5, 8] *B*, а скорость дислокации записывается в виде [5]

$$v = \frac{tb}{B},\tag{1}$$

где τ – сдвиговое напряжение, b – модуль вектора Бюргерса.

Согласно [8], коэффициент сопротивления пропорционален температуре:

$$B = \frac{3kzT}{10b^2c}.$$
 (2)

Здесь k – постоянная Больцмана, z – число атомов в элементарной ячейке, T – температура и c_s – скорость поперечной волны.

В [8] предложена уточненная формула для скорости дислокации:

$$v = \frac{tb}{B} \exp\left(-\frac{\Delta G_{\kappa p}}{2kT}\right),\tag{3}$$

где сделан учет энергии образования $\Delta G_{_{\!\kappa\!p}}$

пары ступенек (изломов) на дислокации.

Таким образом, с ростом температуры скорость дислокации уменьшается, что также подтверждается в нашей модели. На рис.4 изображены зависимости средней скорости краевой и

531

винтовой дислокаций в Ni от температуры при скорости сдвига 20 м/с.



Рис.4. Зависимости средней скорости краевой и винтовой дислокаций в Ni от температуры при скорости сдвига 20 м/с

Заключение

Методом молекулярной динамики проведено исследование скольжения краевой и винтовой дислокаций в никеле в зависимости от температуры и скорости сдвига. Полная дислокация появлялась в настоящей модели сразу в виде расщепленной на пару частичных дислокаций Шокли, разделенных дефектом упаковки. Расстояние между частичными дислокациями составляло несколько нанометров. При высоких скоростях сдвига оно уменьшалось.

При моделировании инициации и движения винтовой дислокации было обнаружено, что она, в отличие от краевой, сравнительно легко может менять плоскость скольжения с (111) на ($\overline{111}$), что объясняется, очевидно, сходством природы ее распространения с распространением поперечной волны.

Для никеля получены зависимости скорости скольжения краевой и винтовой дислокаций в зависимости от скорости сдвига и температуры. Скорость скольжения краевой дислокации выше, чем винтовой, что объясняется отличием скорости распространения продольной и поперечной волн. С ростом температуры скорость скольжения дислокаций снижается. С ростом скорости сдвига скорость возрастает до определенного предела, зависящего от скорости звука в металле. Сначала, примерно до 100 м/с, скорость дислокации с ростом скорости сдвига растет почти линейно, но при приближении скорости дислокации к своему пределу, график становится все более горизонтальным.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках базовой части государственного задания (проект №3.4820.2017/8.9).

Список используемой литературы

1. Фридель Ж. Дислокации. – М.: Мир, 1967. – 660 с.

2. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.

3. Chen C., Meng F., Ou P. et al. Effect of indium doping on motions of <i><a></i>-prismatic edge dislocations in wurtzite gallium nitride // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2019. – V.31 – P. 315701.

4. Olmsted D.L., Hector Jr L.G., Curtin W.A., Clifton R.J. Atomistic simulations of dislocation mobility in Al, Ni and Al/Mg alloys // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2005. – V.13. – P. 371–388.

5. Zhao Sh., Osetsky Yu.N. Zhang Y. Atomicscale dynamics of edge dislocations in Ni and concentrated solid solution NiFe alloys // Journal of Alloys and Compounds. – 2017. – V.701. – P. 1003–1008.

6. Rodney D., Ventelon L., Clouet E., Pizzagalli L., Willaime F. Ab initio modeling of dislocation core properties in metals and semiconductors // Acta Materialia. – 2017. – V.124. – P. 633–659.

7. Hunter A., Beyerlein I.J., Germann T.C., Koslowski M. Influence of the stacking fault energy surface on partial dislocations in fcc metals with a three-dimensional phase field dislocations dynamics model // Physical Review B. -2011. - V.84. - P. 144108.

8. Po G., Cui Y., Rivera D., Cereceda D., Swinburne T.D., Marian J., Ghoniem N. A phenomenological dislocation mobility law for bcc metals // Acta Materialia. – 2016. – V.119. – P. 123–135.

9. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. – 1993. – V.48, No.1. – P. 22–33.

10. Poletaev G., Zorya I., Rakitin R. Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in fcc metals // Computational Materials Science. – 2018. – V.148. – P. 184–189.

11. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю., Табаков П.Я. Молекулярно-динамическое исследование миграции границ зерен наклона в Ni и Ni₃Al // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2019. – Т.155, №1. – С. 96–102.

12. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Исследование формирования избыточного свободного объема в тройных стыках границ зерен при кристаллизации на примере никеля // Физика твердого тела. – 2018. – Т.60, №5. – С. 846–850.

13. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Старостенков М.Д. Особенности образования свободного объема в тройных стыках границ наклона <111> и <100> в Ni при кристаллизации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. – Т.12, №2. – С. 253–258.

14. Полетаев Г.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Потенциалы межатомного взаимодействия в системах Рd-H и Ni-H // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т.13, №3. – С. 411–418.

15. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Взаимодействие атома водорода с краевой дислокацией в Рd и Ni // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т.11, №1. – С. 99–104.

16. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization // Solid State Phenomena. -2016. - V.249. - P. 3-8.

17. Полетаев Г.М., Дмитриенко Д.В., Санников А.В., Старостенков М.Д. Определение диффузионного радиуса и диффузионной проницаемости ненапряженных тройных стыков границ зерен в никеле в условиях деформации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т.11, №1. – С. 17–21.

18. Poletaev G.M., Zorya I.V., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. Molecular dynamics simulation

of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals // International Journal of Materials Research. – 2017. – V.108, No.10. – P. 785–790.

19. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Потекаев А.И. Исследование диффузии атома водорода в кристаллах ГЦК-металлов методом молекулярной динамики // Известия вузов. Физика. – 2011. – Т.54, №12. – С. 86–91.

20. Андриевский Р.А., Глезер А.М. Прочность наноструктур // Успехи физических наук. – 2009. – Т.179, №4. – С. 337–358.

21. Козлов Э.В., Попов Л.Е., Старостенков М.Д. Расчет потенциалов Морза для твердого золота // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1972. – №3. – С. 107.

22. Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Механизмы диффузии по границам зерен в двумерных металлах // Письма в журнал технической физики. – 2005. – Т.31, №15. – С. 44–48.

23. Старостенков М.Д. Кристаллогеометрическое описание планарных дефектов в сверхструктурах: Автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. – Барнаул, 1994. – 85 с.

24. Кулагина В.В., Чаплыгина А.А., Попова Л.А., Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Клопотов А.А. Структурно-фазовые превращения сплавов системы Сu-Pt при атомном упорядочении // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т.55, №7. – С. 78–87.

25. Старостенков М.Д., Дмитриев С.В. Распределение пространственных многогранников по координационным сферам в ОЦК-решетке // Журнал структурной химии. – 1993. – Т.34, №4. – С. 107.

Поступила в редакцию 19.09.19.

Сведения об авторах

Полетаев Геннадий Михайлович, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, gmpoletaev@mail.ru Зоря Ирина Васильевна, к.т.н., доцент СибГИУ, zorya.i@mail.ru

Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, genphys@mail.ru