

# ВЛИЯНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛА НА ДИНАМИЧЕСКУЮ ПЛАСТИЧНОСТЬ И ПРОЧНОСТЬ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

П.А. Жилиев, А.Ю. Куксин, Г.Э. Норман, С.В. Стариков, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва,  
125412, Ижорская, д. 13, стр. 2  
Московский физико-технический институт, Долгопрудный,  
141700, Институтский пер., д. 9

## Аннотация

В работе рассмотрено влияние микроструктуры на пластичность и прочность. Молекулярно-динамические расчеты проведены на примере алюминия, межатомное взаимодействие в котором рассчитывается методом погруженного атома. Исследованы механизмы возникновения и роста дислокационных петель при нескольких способах деформации, определены соответствующие критические сдвиговые напряжения. Сделан вывод, что возрастание плотности дислокаций в алюминии при высокоскоростном деформировании обусловлено не зарождением дислокаций, а размножением их на источниках Франка–Рида, таким образом, скорость зарождения контролируется скоростью движения дислокаций. При рассмотрении процессов разрушения проанализирована зависимость механизмов разрушения и откольной прочности от температуры. При повышенных температурах в процессе растяжения может быть достигнута линия плавления. Наличие дефектов в таком случае инициирует плавление, и разрушение происходит уже в жидкой фазе. Наиболее интенсивно плавление начинается у границ зерен, для монокристаллов же, даже в присутствии дефектов типа полостей и дислокационных петель, достигается заметный перегрев твердой фазы.

## INFLUENCE OF MATERIAL MICROSTRUCTURE ON DYNAMIC PLASTICITY AND SPALL STRENGTH: MOLECULAR-DYNAMIC SIMULATIONS

The work is devoted to study of influence of microstructure on plasticity and spall strength under high strain-rate loading. Molecular dynamics simulations are carried out for aluminum described within embedded atom method. The mechanisms of nucleation and growth of dislocation loops are studied in cases of several loading conditions. Corresponding threshold shear stresses are evaluated as a function of temperature. Simulations of triaxial deformation, corresponding to stretching in rarefaction waves, and the following fracture is presented for single crystal with different defects (dislocations, stacking faults, voids) and for polycrystal. Provided reaching the melting curve the melting starts in polycrystal at grain boundaries and voids arise in liquid phase. The single crystal behaves in a different way. Considerable overheating is observed even in the presence of stacking faults and dislocations. Melting rate depends on temperature and the fracture can start in solid or liquid phase.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Исследуется влияние микроструктуры материала на его пластическую деформацию и разрушение при высокоскоростном деформировании, имеющем место, например, в ударно-волновых явлениях [1]. Изучаются механизмы зарождения и роста дислокационных петель в кристалле без дефектов и при наличии полостей при деформациях одноосного сжатия и чистого сдвига. Оценены критические напряжения для зарождения дислокационных петель.

Рассматривается влияние дислокационной подсистемы, дефектов упаковки, двойников, полостей, границ зерен на механизмы разрушения при всестороннем растяжении. В большинстве случаев влияние дефектов проявляется посредством концентрации (или наоборот, релаксации) локальных напряжений. Это может привести к активации пластичности (даже при внешней гидростатической нагрузке), инициированию разрушения или плавления на стыках дислокационных петель. Активное плавление может начинаться в областях с сильно дефектной структурой, например, на границах зерен. Плавление в свою очередь приводит к эффективной релаксации напряжений и возможности достижения больших степеней деформации. Разрушение происходит уже в жидкой фазе, и прочность определяется прочностью жидкости на разрыв.

Исследование механизмов деформации и разрушения проводится на примере алюминия с помощью молекулярно-динамического моделирования. Для описания межатомного взаимодействия в Al используется многочастичный потенциал погруженного атома [2] (embedded atom method potential). Его параметризация обеспечивает количественное согласие с широким набором данных экспериментов и *ab initio* расчетов, включая равновесную постоянную решетки, модули упругости, энергии точечных дефектов, поверхностей, дефектов упаковки, уравнение состояния.

## 2. ПЛАСТИЧНОСТЬ

В плоских волнах сжатия и разрежения условия нагружения в упругой области соответствуют одномерной деформации. Переход к пластической области характеризуется некоторой пороговой величиной сдвиговых напряжений и приводит в дальнейшем к их релаксации. Скорость пластической деформации определяется плотностью подвижных дислокаций  $\rho_m$  и скоростью  $v$  их движения:  $\dot{\epsilon} = \rho_m b v$ . Скорость движения дислокаций зависит от величины действующих сдвиговых напряжений:  $b\sigma = Bv$ , где  $b$  – вектор Бюргера, а  $B$  – коэффициент трения дислокации. Отсюда можно заключить, что динамический предел текучести

материала  $\sigma_y$  зависит от скорости деформирования, величины трения и плотности дислокаций [1,3].

При высокоскоростной деформации движение дислокаций происходит в динамическом режиме, когда сдвиговые напряжения настолько велики, что позволяют дислокациям свободно преодолевать барьеры Пайерлса. Скорость движения дислокаций в таком случае ограничивается взаимодействием дислокации с колебаниями кристаллической решетки, т.е. фоновым трением [3]. Скорость движения дислокации в монокристалле алюминия в зависимости от приложенного напряжения сдвига и температуры уже изучалась ранее с помощью МД [4]. На основании полученных данных была определена зависимость коэффициента фонового трения дислокаций от температуры. Рассчитанная зависимость близка к линейной, предсказываемой теоретически [3], а существенные отклонения проявляются лишь при температурах вблизи температуры плавления.

В данной работе рассмотрим подробнее, каким образом происходит изменение плотности дислокаций при ударно-волновом нагружении. Одним вариантом, требующим небольших напряжений, является источник Франка–Рида [5], где размножение дислокаций происходит вследствие изгиба отрезка дислокации с закрепленными концами. В условиях высоких скоростей деформации напряжение может достичь больших величин и следует рассматривать возможность зарождения новых дислокаций. Оценим далее напряжения, необходимые для возникновения дислокационных петель в монокристалле без дефектов, а также при наличии полостей.

Рассмотрим для определенности случай, когда сжатие *зук* решетки монокристалла происходит в кристаллографическом направлении [100]. Тогда вдоль плоскостей скольжения (111), характерных для *зук* решетки, возникают касательные напряжения, которые и обеспечивают появление дислокационных петель. Поэтому помимо одноосного сжатия, рассмотрим также процесс возникновения дислокаций при чистом сдвиге в плоскости (111) в направлении [1-10].

### 2.1. Гомогенное зарождение дислокаций

Для моделирования зарождения по гомогенному механизму использовалась кубическая расчетная ячейка (длина ребра около 12 нм) в трехмерных периодических граничных условиях. Вначале система выводилась на равновесие при заданной температуре и нулевом давлении. Затем происходило сжатие вдоль направления [100] (т.е. вдоль оси *x*, см. рис. 1) и растяжение вдоль других направлений для достижения одноосно напряженного состояния. В результате возникают сдвиговые напряжения вдоль плоскостей скольжения дислокаций, некоторые из которых показаны на рис. 1. Сдвиговые напряжения  $\sigma_{\text{сдвиг}}$  вдоль направления движения дислокации [1-10] в плоскости (111) можно рассчитать из напряжений вдоль оси сжатия  $P_{xx}$ . При достижении требуемого значения сдвиговых напряжений деформирование останавливается и проводится ожидание зарождения дислокации при фиксированном напряженном состоянии. Такая модель позволяет подробнее проследить процесс зарождения и определить

скорость зарождения в отличие от ударно-волновой модели, где процесс нуклеации происходит за короткое время и в сложно контролируемых условиях.

В процессе зарождения можно выделить несколько этапов. Под действием термических флуктуаций образуются и исчезают зародыши плоскостей сдвига (рис. 2а). Происходит зарождение петли не полной, а частичной, дислокации, при этом внутри петли находится дефект упаковки. При образовании петли критического размера происходит ее дальнейший рост (рис. 2б-д). При достижении размера дефектной структуры 3 нм (примерно в 2 раза больше равновесного расстояния между частичными прямолинейными дислокациями) зарождение второй частичной дислокации внутри дефекта упаковки не происходит (как наблюдается в случае чистого сдвига), а вместо нее формируется двойник (рис. 2д). Возможно, указанное различие связано с наличием сдвиговых напряжений вдоль нормального направления к исходной плоскости сдвига.

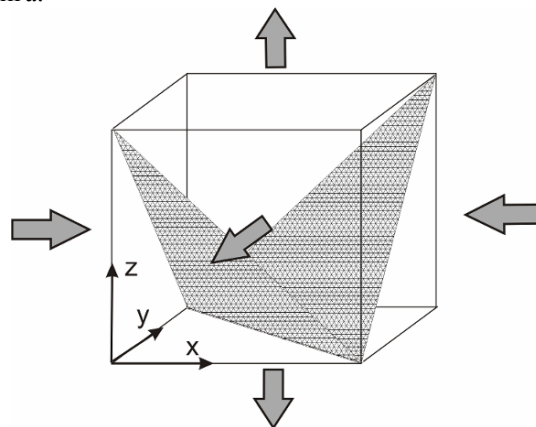


Рис. 1. Схема деформирования кристалла для создания одноосно напряженного состояния. Заштрихованы плоскости скольжения (111) и (1-1)

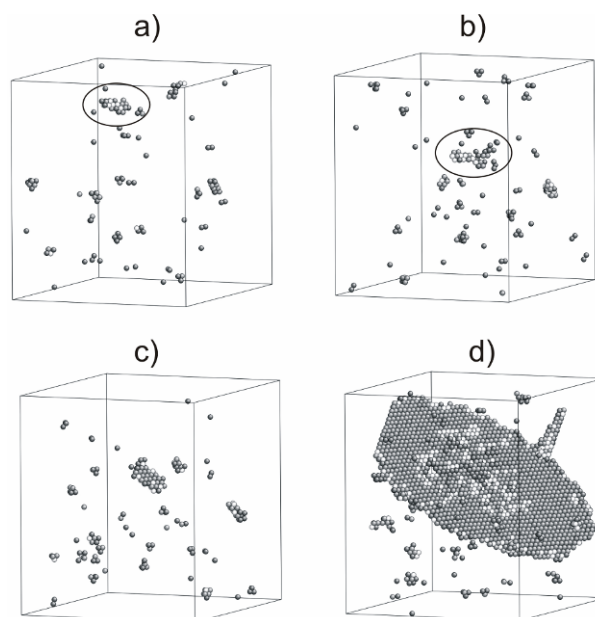


Рис. 2. Визуализация процесса релаксации напряжения. а) – зарождение докритических зародышей сдвига; б) – появление критического зародыша; в) – рост плоскости сдвига; д) – образование петли частичной дислокации и двойника внутри петли.  $T = 300 \text{ K}$ ,  $P_{xx} = 3.43 \text{ ГПа}$

Поскольку процесс активации пластичности носит флуктуационный характер, то имеет место большой разброс времен жизни монокристалла в состоянии с заданными сдвиговыми напряжениями и температурой. За время жизни принимается время от момента фиксирования деформирования до момента появления дислокационной петли критического размера. Распределение времен жизни близко к Пуассоновскому и может характеризоваться средним временем жизни  $\langle \tau \rangle$ . Частота гомогенного зарождения дислокаций определяется по аналогии со скоростью нуклеации жидкости в перегретом кристалле [6,7], а именно, через среднее значение времени жизни состояния:  $J = 1/(\langle \tau \rangle N)$ .

Скорость нуклеации можно получить на основе теории дислокаций [5]. Она выражается через свободную энергию петли частичной дислокации критического размера:

$$J = \frac{8\pi \cdot r^* \cdot \nu}{b} \exp(-\Delta G^*/kT),$$

где  $\Delta G^*$  – свободная энергия петли критического радиуса  $r^*$ ,  $\nu$  – дебаевская частота ( $\sim 10^{13} \text{ c}^{-1}$ ),  $b$  – вектор Бюргерса ( $\sim 1.7 \text{ \AA}$ ). Свободная энергия включает в себя три члена: энергия петли дислокации  $W$ ; энергия, связанная с работой внешнего сдвигового напряжения при деформации; и энергия дефекта упаковки в случае частичной дислокации:

$$\Delta G = W - \pi r^2 b \sigma + \pi r^2 \gamma,$$

$$W = 2\pi r \frac{2-\nu}{2(1-\nu)} \frac{\mu b^2}{4\pi} \left[ \ln\left(\frac{4r}{\rho}\right) - 2 \right].$$

Здесь  $\gamma$  – энергия дефекта упаковки ( $0.16 \text{ Дж/м}^2$ );  $\nu$  – коэффициент Пуассона (0.41);  $\mu$  – модуль сдвига вдоль направления [1-10] (28 ГПа). Не имеет четкого значения параметр  $\rho$ , который характеризует размер ядра дислокации. В [5] приведено выражения  $\rho = b/2\alpha$ , где  $\alpha$  примерно равно 6. Для получения размера критического радиуса необходимо решить трансцендентное уравнение. Однако значения критического радиуса, рассчитанные с помощью этих формул, получаются завышенными примерно на порядок по сравнению с наблюдаемыми в МД расчетах для нескольких температур и напряжений. Скорость зарождения петель с соответствующими радиусами получается фактически нулевой по сравнению с данными МД. Такие различия, возможно, связаны с неправильным определением характерного размера ядра или вообще с неприменимостью формул.

### 2.3. Зарождение дислокаций на полостях при сдвиге

Для изучения гетерогенного механизма применялась модель чистого сдвига. В верхней части рис.3 представлена схема расчетной ячейки для этой модели. Направления осей ориентированы соответственно одной из систем скольжения, типичной для ГЦК решетки, какой обладает алюминий, а именно [1-10] (111). Зарождение и рост дислокационной петли происходит в плоскости  $xz$ , т.е. (111).

Сдвиговое напряжение осуществлялось приложением внешней силы к блоку атомов R (жестко фиксированных друг относительно друга), в то время как

блок F остается зафиксированным. Сдвиговое напряжение в системе постепенно увеличивается до тех пор, пока не достигнуто критическое напряжение, приводящее к формированию дислокационной петли. Скорость деформации может варьироваться в большом диапазоне. Модель характеризуется тем, что сдвиговые напряжения прикладываются в строго определенном направлении и активизируется лишь одна система скольжения. На поверхности пор и включений примеси существуют выделенные места, где начинается формирование дислокационных петель. Их наличие обусловлено анизотропией распределения локальных напряжений вокруг дефектов.

Зарождение дислокационной петли в гетерогенном случае, на поверхности полости радиусом 1.0 нм, представлено на рис.3.

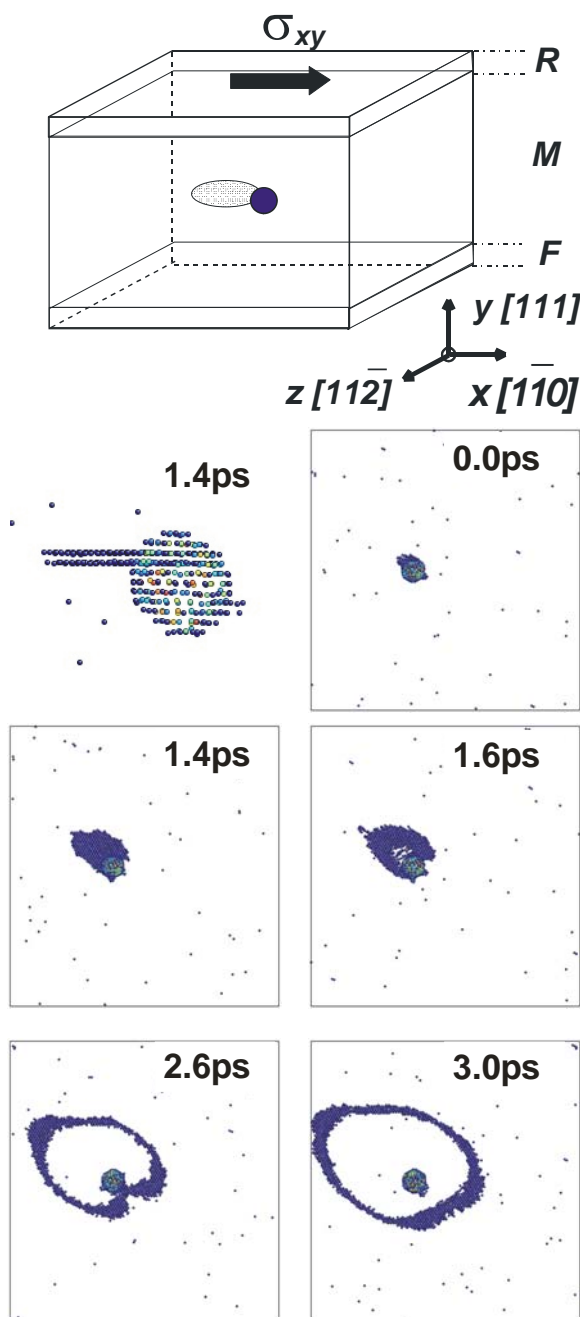


Рис. 3. Схема моделирования и стадии процессов формирования и роста дислокационной петли на полости при чистом сдвиге. Показаны атомы, составляющие дефекты кристалла

Видно, что вблизи поверхности полости формируется и постепенно увеличивается в размерах дефект упаковки. Далее внутри дефекта упаковки происходит зарождение второй частичной дислокации. Напряжения, необходимые для зарождения дислокации, велики, поэтому рост петли происходит в режиме асимптотического приближения скорости дислокации к скорости звука.

Наибольшая скорость роста петли достигается в направлении приложения сдвиговых напряжений и противоположном ему. В ходе дальнейшего роста петли происходит огибание исходного препятствия с двух сторон и смыкание концов с последующим отрывом петли от поверхности полости.

#### 2.4. Зарождение дислокаций на полостях при сжатии

Рассмотрим поведение материала с полостью при одноосном сжатии вдоль оси с кристаллографическим направлением [100]. В ходе деформации происходит схлопывание полости, при этом на её месте начинает расти дислокационная структура, состоящая из нескольких дислокационных петель (рис. 4а). Дальнейший рост петель может привести к зарождению внутри дефекта упаковки двойниковой структуры (рис. 4а,b), либо частичной дислокации и исчезновению дефекта упаковки (рис. 4а). Наблюдается также образование точечных дефектов.

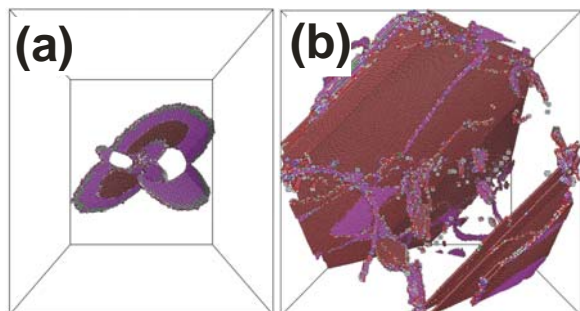


Рис.4. Возникновение дислокационных петель и двойников при одноосном сжатии. Расчетная ячейка 40x40x40 нм,  $T_0 = 100$  К. Показаны только атомы, составляющие дефекты кристалла

Данные о зависимости критического напряжения зарождения дислокации от температуры представлены на рис.5 для двух вариантов деформирования. Точки 1 и 3 соответствуют монокристаллу без дефектов, а 2 и 4 – случаю с полостью радиусом 1.0 нм. Пороговые напряжения для одноосно напряженного состояния сжатия оказываются меньше, чем при чистом сдвиге, поскольку сжатие сопровождается значительным уменьшением модулей упругости, что снижает барьер для возникновения дислокации.

### 3. РАЗРУШЕНИЕ

Данный раздел посвящен рассмотрению разрушения, возникающего в ударно-волновых экспериментах при интерференции волн разрежения, распространяющихся от свободных поверхностей мишени и ударника. Разрушение в таком случае локализовано: происходит откол. Поскольку откольная прочность алюминия существенно превышает по величине пре-

дел текучести [1], то имеет место релаксация девиаторных напряжений. Поэтому деформацию в волнах разрежения можно приблизительно рассматривать как всестороннее растяжение. Именно в такой постановке выполнены дальнейшие расчеты.

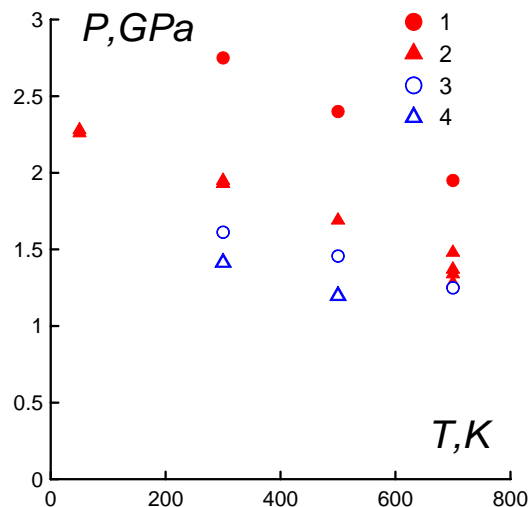


Рис.5. Температурная зависимость пороговых касательных напряжений, необходимых для зарождения дислокационной петли в монокристаллическом Al. Чистый сдвиг: 1 – без дефектов; 2 – с полостями  $r = 1$  нм. Одноосное сжатие: 3 – без дефектов; 4 – с полостями  $r = 1$  нм

#### 3.1. Дислокационная подсистема

Дислокационная подсистема в монокристалле создается в результате релаксации к нулю нормальных напряжений в системе, полученной при одноосном сжатии (п. 2.4). В результате образуется структура с дислокациями, двойниками и вакансиями.

При растяжении наблюдается движение дислокаций, несмотря на то, что внешних сдвиговых напряжений нет. Этот факт объясняется наличием сильных локальных напряжений, которые обусловлены неоднородностью структуры. При достижении критической величины давления происходит активное зарождение и рост дислокаций (рис.6а). Вскоре на стыках дислокационных петель наблюдается возникновение полостей (рис.6б).

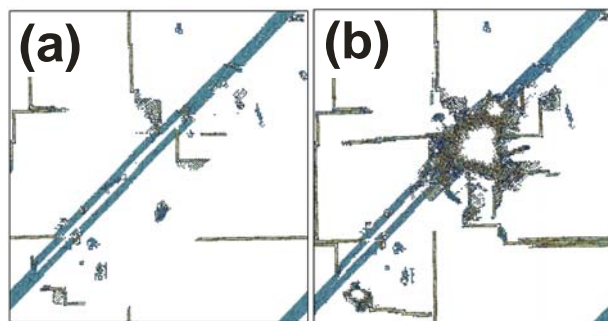


Рис. 6. Зарождение полостей в монокристалле с дислокационной подсистемой при всестороннем растяжении. Расчетная ячейка 40x40x40 нм,  $T_0 = 100$  К. Показаны только атомы, составляющие дефекты кристалла

На рис.7 представлена диаграмма растяжения для различных температур при фиксированной скорости растяжения  $\dot{V}/V = 2 \times 10^9 \text{ c}^{-1}$ . Диаграмма для  $T=700\text{K}$  существенно отличается от диаграмм для меньших



температур. Это объясняется тем, что в процессе растяжения кристаллическая структура начинает плавиться, и жидкость обеспечивает эффективную релаксацию напряжений.

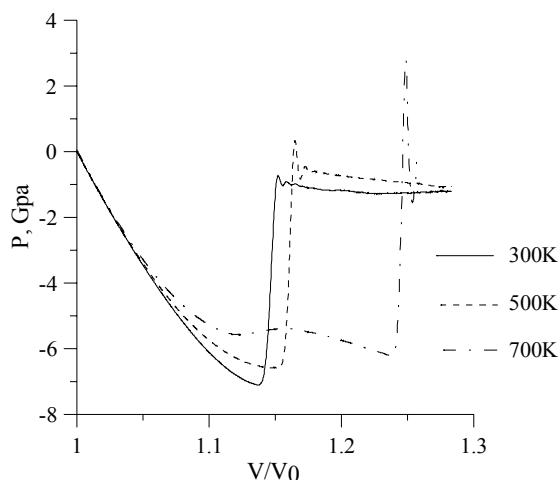


Рис. 7. Диаграмма всестороннего растяжения монокристалла с дислокационной подсистемой для различных температур. Расчетная ячейка  $25 \times 25 \times 25$  нм

Прочность жидкой фазы на разрыв оказывается сопоставимой с прочностью кристалла (по крайней мере, для этого потенциала). Это обеспечивает расплавление значительной части системы и достижение больших степеней деформации. Полости образуются уже в жидкой фазе.

### 3.2. Поликристаллическая структура

Для поликристаллических структур плавление при растяжении выражено наиболее сильно, так как структура межзеренных границ ближе всего к аморфной из всех рассмотренных типов дефектов. Плавление инициируется на границах зерен (рис.8) даже несколько раньше линии плавления объемного кристалла (ср. кривые 2 и 4 на рис.9). Это можно объяснить зависимостью температуры плавления от размера зерна.

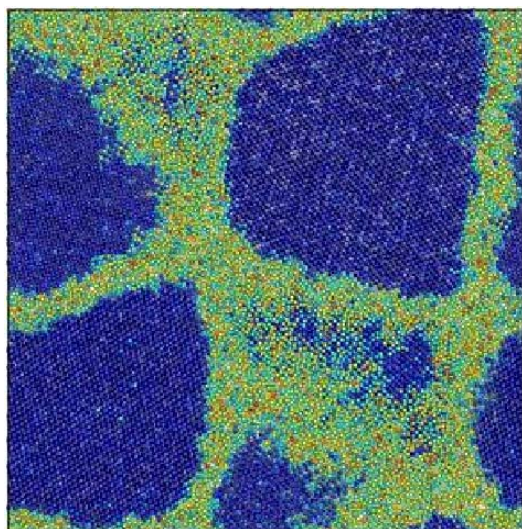


Рис.8. Плавление, инициируемое на границах зерен при всестороннем растяжении. Раскраска по параметру центральной симметрии.  $T_0 = 500$  К, линейная деформация 1.049, размер системы  $25 \times 25 \times 25$  нм, скорость деформирования  $\dot{\gamma}/V = 10^9$  с $^{-1}$

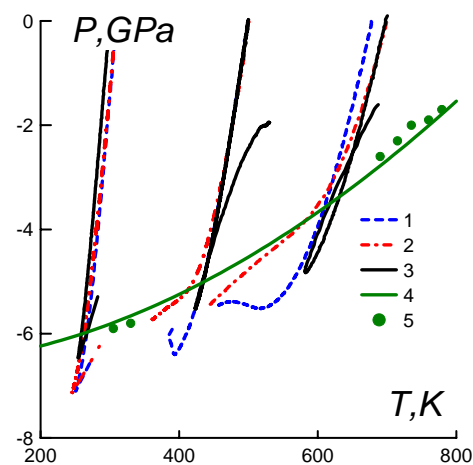


Рис.9. Ход кривых всестороннего растяжения на  $p$ - $T$  диаграмме при наличии дефектов: 1 – дислокационной подсистемы; 2 – границ зерен; 3 – полости  $r = 1$  нм. Линия 4 является аппроксимацией по формуле Симона МД расчетов 5 равновесия кристалл – жидкость

В области низких температур плавления на межзеренных границах не происходит, но имеет место увеличение толщины границ, выделяемой по значению параметра центральной симметрии [8], характеризующего локальную симметрию окружения данного атома.

### 3.3. Структура с полостями

В расчетах наблюдается, что плавление на поверхности полости не начинается даже при значительном заходе за линию плавления (ср. линии 3 и 4 на рис.9). При достижении определенного порогового давления начинается рост полости. Инициирование роста происходит флуктуационно, так как имеется разброс во временах начала роста пор. Оценка критического напряжения, необходимого для спонтанного роста, в приближении упругих деформаций оказалась завышенной.

Наблюдается конкуренция двух механизмов роста: за счет аморфизации кристаллической решетки вокруг растущей поры и за счет локального сдвига с образованием дислокационных петель. Аморфизация имеет место преимущественно в случаях больших скоростей роста полости, например, при заходе вглубь метастабильной области в результате быстрого растяжения. При меньших степенях растяжения рост происходит с меньшей скоростью, а дислокационный механизм становится преобладающим. Так, спонтанный рост полостей (рис.1), даже при высоких температурах, идет за счет образования и исчезновения дислокационных петель.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, методом МД рассмотрен процесс пластической деформации монокристалла за счет гомогенного и гетерогенного (на полостях) зарождения дислокационных петель и их роста. Определена скорость зарождения по аналогии со скоростью гомогенной нуклеации. Исследованы механизмы появления дислокаций и двойников в одноосно напряженном состоянии при сжатии, при чистом сдвиге и при одноосной деформации. Обнаружены выделенные места на поверхности

пор и кластеров, в которых начинается формирование дислокационных петель. Определены температурные зависимости напряжений активации рассмотренных механизмов. Однако, даже с учетом неоднородностей, для зарождения дислокационных петель требуются достаточно большие сдвиговые напряжения, около 1 ГПа. Это дает основания полагать, что увеличение плотности дислокаций в ударных волнах происходит в основном за счет источников типа Франка–Рида и лимитируется, в конечном счете, скоростью движения дислокаций.

При рассмотрении процессов разрушения проанализировано влияние плавления на кинетику разрушения и откольную прочность. При рассмотренных температурах и скоростях деформирования  $10^8 - 10^9 \text{ с}^{-1}$  для всех микроструктур происходит заход за продолжение кривой плавления в область отрицательных давлений. Однако степень перегрева различна (рис. 9). Наиболее интенсивно плавление начинается у границ зерен. Для нанокристаллических материалов температура плавления зависит от размера зерна, и плавление наступает раньше. Для монокристаллов же, даже в присутствии дефектов типа полостей и дислокационных петель, достигается заметный перегрев твердой фазы. Прочность жидкости при всестороннем растяжении и температурах около температуры плавления сравнима с прочностью кристалла, но величина прочности существенно зависит от выбора межатомного потенциала.

Расчеты выполнены на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ (ГУ), на кластере МСЦ РАН при использовании пакета для МД моделирования LAMMPS [9]. Авторы выражают признательность Г.И. Канелю за полезные обсуждения и интерес к данной работе.

## СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

МД – молекулярная динамика;  
 $\rho_m$  – плотность подвижных дислокаций;  
 $b$  – вектор Бюргерса;  
 $B$  – коэффициент трения дислокации.  
 $\sigma$  – напряжение;  
 $P$  – давление;  
 $T$  – температура;  
 $N$  – число частиц в системе;  
 $\tau$  – время жизни;  
 $J$  – частота нуклеации дислокационных петель;  
 $r$  – радиус дислокационной петли или радиус полости;  
 $\Delta G^*$  – свободная энергия петли критического радиуса  $r^*$ ;  
 $\nu$  – дебаевская частота  
 $\nu$  – коэффициент Пуассона;  
 $\mu$  – модуль сдвига;  
 $V_0$  – начальный объем системы;  
 $\varepsilon$  – деформация  $\varepsilon = V/V_0$ ;  
 $\dot{\varepsilon}$  – скорость деформации.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Канель Г.И., Фортон В.Е., Разоренов С.В. Ударные волны в физике конденсированного состояния // УФН. 2007. Т.177. №8. С.809.
2. Liu X.-Y., Ercolessi F., Adams J.B. Aluminium interatomic potential from density functional theory calculations with improved stacking fault energy // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 2004. № 12. P. 665.
3. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Динамическое торможение дислокаций. // УФН. 1975. Т.115. №1. С.3.
4. Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. Молекулярно-динамическое моделирование динамики краевой дислокации в алюминии // Доклады академии наук. 2008. Т.420. № 4. С.467.
5. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972.
6. Скрипов В.П., Коверда В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. // М.: Наука, 1984. 232 с.
7. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Гомогенная нуклеация в перегретом кристалле. Молекулярно-динамический расчет // ДАН. Т. 386. № 3. 2002. С. 328.
8. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // Phys. Rev. B V. 58. 1998. P. 11085.
9. Plimpton S.J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. V. 117. 1995. pp. 1–19. <http://lammps.sandia.gov/index.html>