

## Гомогенное зарождение дислокаций

© Г.Э. Норман, А.В. Янилкин

Объединенный институт высоких температур РАН,  
Москва, Россия

Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет),  
Долгопрудный, Московская обл., Россия

E-mail: aleyanilkin@gmail.com

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 24 января 2011 г.)

Исследованы механизм и стохастические свойства процесса гомогенного зарождения дислокаций. Предложен подход для определения скорости зарождения на основе рассмотрения времен жизни метастабильного состояния. Для получения первичных данных использован метод молекулярной динамики. Определены зависимости скорости зарождения от значений сдвиговых напряжений для нескольких температур. Предложена аппроксимация полученных результатов в рамках формулы Аррениуса. Проведена оценка области сдвиговых напряжений и температур, в которой может реализоваться механизм гомогенного зарождения дислокаций.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 09-08-12161-оф-м и 09-08-01116-а, программ фундаментальных исследований РАН № 2, 13, 22, ОЕ-12, ФПЦ „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ по теме „Исследования механики высокоскоростного деформирования и разрушения высокопрочных хрупких материалов и создание керамик с повышенной стойкостью к удару“ № 02.740.11.0200.

### 1. Введение

Основными механизмами пластической деформации являются зарождение, размножение и движение дислокаций — элементарных переносчиков сдвиговой деформации [1]. Вопросы, связанные с размножением и движением, подробно рассмотрены в [1–3]. Настоящая работа посвящена исследованию зарождения дислокаций.

Гомогенное зарождение можно наблюдать в условиях ударно-волнового нагружения, когда скорости деформации настолько велики, что сдвиговые напряжения не успевают релаксировать за счет размножения и движения существующих дислокаций. Экспериментально исследовать этот процесс довольно затруднительно, поскольку в настоящее время не существует диагностики плотности дислокаций во время распространения ударной волны.

Основные экспериментальные результаты по зарождению дислокаций получены при наноиндентировании [4–8]. В результате малости размера индентора (сотни нанометров) локальные напряжения возникают в небольшой области, и дислокации, уже существующие в кристалле, не активируются. Это приводит к возникновению сдвиговых напряжений, близких к теоретическому пределу на сдвиг, и зарождению дислокаций. Проведение большого числа идентичных экспериментов позволяет исследовать стохастические свойства процесса зарождения, а именно получить зависимости вероятности зарождения дислокаций от времени действия нагрузки [8].

К одной из первых работ по теоретическому описанию гомогенного зарождения дислокаций можно отнести работу [1]. Предполагается, что образование зародышей петель обусловлено локальным смещением одной части

атомов относительно другой на вектор Бюргерса. На основании теории упругости определены энергия зародышей петель в зависимости от их размера и оценена скорость зарождения для зародышей критического радиуса на основе бoльцмановского распределения.

В работах [9–12] предложен альтернативный механизм. Зарождение петли представлено как наноскопический идеальный сдвиг, величина которого постепенно увеличивается в процессе зарождения, а размер самого зародыша остается примерно постоянным. Авторы этих работ считают, что такой механизм преимущественно реализуется в нанокерамиках или сплавах [13–15].

В настоящее время в литературе практически не представлено работ, непосредственно определяющих скорость гомогенного зарождения, что позволило бы проверить теоретические выкладки. Наиболее подходящим для исследования скорости зарождения является атомистическое моделирование, основанное на использовании реалистических потенциалов межатомного взаимодействия. Большинство работ как по моделированию ударных волн [16,17] или деформации [18], так и по моделированию наноиндентирования [19–21] посвящено исследованию критических напряжений зарождения. Это напряжение зависит от длительности ожидания зарождения и является скорее оценочной величиной. Более естественной величиной является вероятность или скорость зарождения.

Настоящая статья посвящена исследованию гомогенного зарождения и определению кинетики прямым моделированием методом молекулярной динамики (МД). В прямых МД-расчетах будет определена скорость зарождения дислокаций для фиксированной степени деформации и температуры. Расчеты основаны на анализе

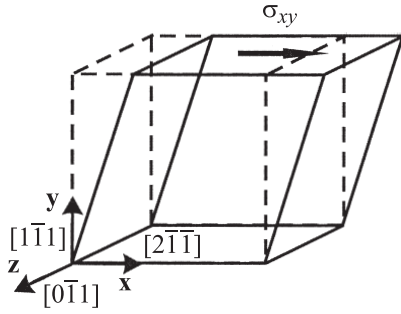


Рис. 1. Схема сдвигового деформирования кристалла.

зарождения дислокаций как спонтанного процесса распада метастабильного состояния, определении функции распределения моментов зарождения.

## 2. Моделирование гомогенного зарождения дислокаций

2.1. Молекулярно-динамическая модель. Для исследования процесса зарождения используется следующая модель. Рассматривается бездефектный кристалл, находящийся в периодических граничных условиях вдоль всех трех направлений. Это сделано для исключения влияния поверхности на процесс зарождения. Форма расчетной ячейки близка к кубической, рассматриваются два размера системы с числом атомов:  $N = 108\,000$  и  $504\,000$ . Взаимодействие между атомами описывается с помощью потенциала погруженного атома (embedded atom method) [22]. Используемый в этой работе потенциал для алюминия [23] был параметризован на основе данных об упругих модулях, энергии образования различных дефектов, информации о фононном спектре и некоторых других характеристиках материала, полученных из экспериментов или квантовых расчетов. Для проведения МД-расчетов используется пакет программ LAMMPS [24].

Вначале бездефектный кристалл подвергается сдвиговой деформации вдоль направления вектора Бюргерса частичной дислокации  $\mathbf{b} = a/6[2\bar{1}1]$  (рис. 1), где  $a$  —

период решетки. Затем с помощью термостата система выводится на равновесие при заданной температуре и фиксируемой деформации. Рассмотрены три температуры:  $T = 300, 500, 700$  К. В условиях такого деформирования направление действия сдвиговых напряжений совпадает с вектором смещения атомов, происходящего при образовании зародышей дислокационных петель. В результате этого активируется только одна плоскость и одно направление скольжения. Влияние напряженного состояния, возникающего при других способах деформирования, на величину сдвиговых напряжений, при которых происходит зарождение дислокаций, рассмотрено в [21,25].

Созданное напряженное состояние системы является метастабильным и обладает конечным временем жизни вдоль МД-траектории. Механизмом потери устойчивости такого состояния является спонтанное появление дислокаций критического размера.

2.2. Механизм гомогенного зарождения дислокаций. На рис. 2 показаны характерные моменты процесса зарождения петли дислокации. Под действием флуктуаций, возникающих при решении уравнений Ньютона при постоянных числе частиц и объеме, в плоскостях скольжения образуются и исчезают докритические зародыши дислокационных петель (рис. 2, *a*). Механизм образования носит термический характер и заключается в сдвиге части атомов на вектор Бюргерса  $\mathbf{b}$  частичной дислокации. Периметр такого сдвига можно представить как петлю частичной дислокации. Зарождение частичной дислокации, а не полной, объясняется тем, что полная дислокация в ГЦК-кристаллах диссоциирует на две частичные, более энергетически выгодные. Такие зародыши спонтанно возникают по всему объему и схлопываются за время порядка пикосекунды.

Момент возникновения закритического зародыша показан на рис. 2, *b*. Зародыш не имеет строгой формы, поскольку является флуктуацией, но его можно описать эллипсом, вытянутым вдоль направления приложения сдвиговых напряжений. Характерный размер зародыша составляет около 15 атомов, что близко к результатам моделирования ударно-волнового нагружения меди [16], где зародыш состоял из 25 атомов. За одну пико-

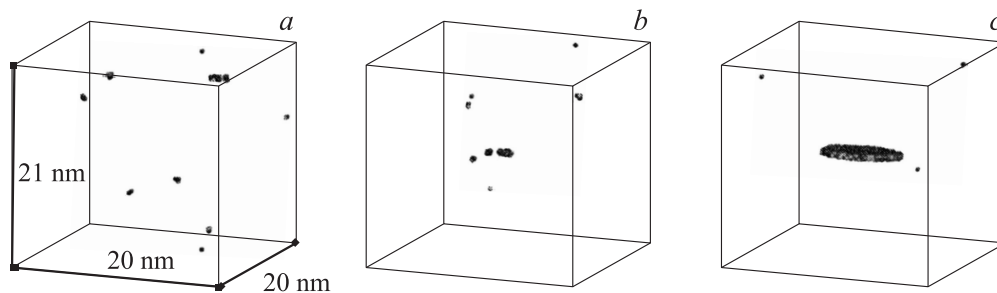
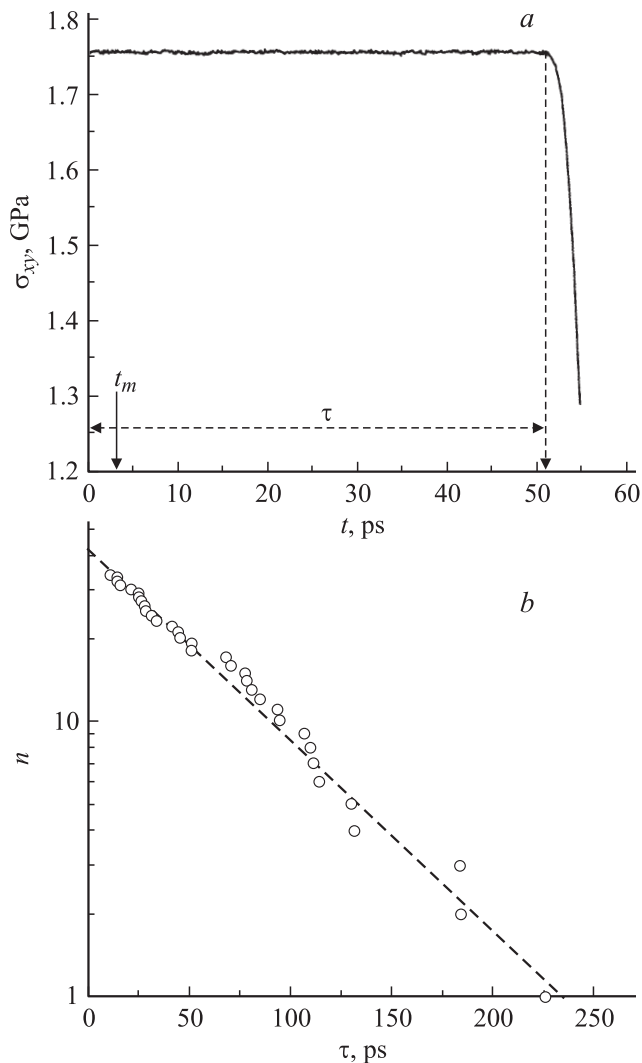


Рис. 2. Визуализация процесса зарождения петли дислокации. Показаны только атомы с дефектным локальным окружением. *a* — зарождение докритических зародышей сдвига ( $t = 38$  ps), *b* — появление критического зародыша ( $t = 50$  ps), *c* — рост петли дислокации и увеличение дефекта упаковки ( $t = 51$  ps).  $T = 300$  К,  $\sigma_{xy} = 1.76$  GPa.



**Рис. 3.** Пример определения скорости зарождения дислокаций из времени жизни метастабильного состояния. *a* — релаксация напряжений после фиксирования степени деформирования,  $t_m$  — время динамической памяти; *b* — число траекторий  $n$ , в которых не произошло зарождения к моменту времени  $\tau$ .  $T = 300$  К.

секунду петля дислокации значительно увеличивается в диаметре. На рис. 2, *c* показан образующийся дефект упаковки в виде эллипса. Он образовался в результате движения дислокации, которая ограничивает его. Исходя из размеров системы можно оценить скорость движения (скорость увеличения петли) дислокации  $v_{\text{disl}} = 28 \text{ \AA/ps}$ , что соответствует „релятивистскому“ пределу по отношению к скорости звука движения дислокаций [26,27]. Более подробно кинетика увеличения размера дефекта упаковки с помощью МД исследовалась, например, в [28].

На рис. 3, *a* представлена зависимость сдвиговых напряжений от времени, соответствующая рис. 2, *a-c*, начиная с момента фиксирования степени деформации. Сдвиговые напряжения определялись для всей

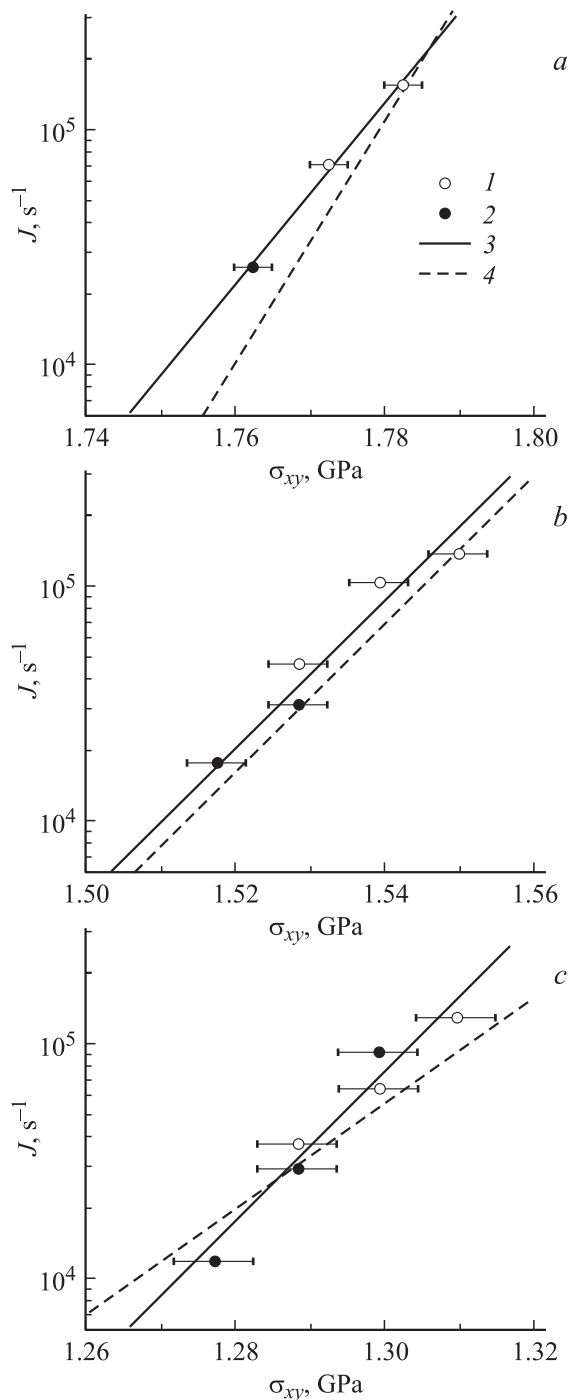
расчетной ячейки по теореме вириала [29], т.е. являются средними значениями. На равновесном участке (рис. 2, *a*) наблюдается слабое дрожание напряжений, вызванное термическими флуктуациями, в результате которых возникают докритические зародыши. При этом средние сдвиговые напряжения в системе остаются постоянными. В некоторый момент (рис. 2, *b*) происходит образование зародыша закритического радиуса и его быстрый рост (рис. 2, *c*), что приводит к падению сдвиговых напряжений. Время до момента возникновения критического зародыша  $\tau$  характеризует время жизни системы в данном метастабильном состоянии.

2.3. Метод определения скорости зарождения. Был использован способ расчета скорости зарождения, основанный на результатах моделирования методом МД и предложенный в 2002 г. [30,31]. В этих работах метод был применен к исследованию зарождения расплава в перегретом кристалле. Способ основан на определении среднего времени жизни метастабильного состояния из МД. Из единичного МД-расчета получается одно значение времени жизни  $\tau_i$ . Для получения набора времен жизни необходимо провести несколько независимых расчетов. Требования к ансамблю независимых траекторий можно найти в [30,31]. В качестве основного можно выделить следующее: МД-траектории должны соответствовать одному макроскопическому состоянию, но различным микроскопическим. При этом время расчета должно превышать время динамической памяти системы  $t_m$ , что характеризует время разбегания исходно близких траекторий. Ансамбль независимых траекторий, соответствующих одному макросостоянию, набирается путем использования различных реализаций распределения Максвелла по скоростям в начальный момент времени, соответствующего одной и той же температуре. Время динамической памяти  $t_m$  в нашем случае примерно равно 3 ps.

На рис. 3, *a* показана релаксация сдвиговых напряжений в результате зарождения дислокации и соответствующее время жизни. Для определения среднего времени необходимо провести несколько десятков независимых подобных расчетов. Все они должны соответствовать одной степени метастабильности макроскопического состояния. Под макросостоянием в данном случае понимается заданная температура  $T$  и степень сдвиговой деформации, которую можно характеризовать значением сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$ . На рис. 3, *b* показана зависимость числа траекторий  $n$ , в которых зарождение дислокации не произошло к моменту времени  $\tau$ . Такая зависимость соответствует распределению времен зарождения. Подобная экспоненциальная зависимость вероятности зарождения от времени действия фиксированной нагрузки наблюдалась как в экспериментах по наноиндентированию [8], так и в других экспериментах по распаду метастабильного состояния [32].

Удобно ввести в рассмотрение также частоту (или скорость) зародышеобразования  $J$ , имеющую смысл среднего числа зародышей, образующихся в системе

за единицу времени, и являющуюся важной кинетической характеристикой метастабильной фазы. Будем относить  $J$  к одной частице метастабильной системы, тогда получаем  $J = 1/(N\langle\tau\rangle)$ , где  $N$  — число атомов в системе,  $\langle\tau\rangle$  — среднее время ожидания образования



**Рис. 4.** Зависимость скорости зарождения дислокаций от значений сдвиговых напряжений для температур  $T = 300$  (а),  $500$  (б) и  $700$  К (с). МД-расчеты проведены для размеров системы  $N = 180\,000$  (1) и  $504\,000$  атомов (2). 3 — аппроксимация по формуле (1) всех МД-точек, 4 — аппроксимация по формуле (1) для каждой температуры.

зародыша. Среднее время  $\langle\tau\rangle$  совпадает с характеристическим временем  $\tau_d$ , описывающим распределение времен зарождения  $n = n_0 \exp(-\tau/\tau_d)$ .

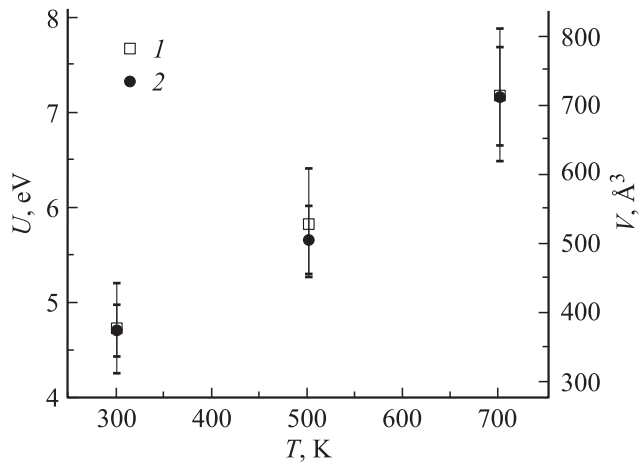
2.4. Результаты. На основе МД-расчетов были получены зависимости скоростей зарождения от сдвиговых напряжений для трех температур:  $300$ ,  $500$  и  $700$  К (рис. 4). Использовались две системы с разными размерами ( $N = 108\,000$  и  $504\,000$  атомов). Это позволило проверить отсутствие влияния периодических граничных условий на зарождение дислокаций. Влияние таких граничных условий на скорость зарождения может возникнуть из-за взаимодействия зародыша дислокационной петли и его периодического отображения. Энергию взаимодействия можно оценить из формулы для взаимодействия двух дислокационных петель [1,33]. Для размера системы  $10$  nm и радиуса петли  $5$  Å энергия взаимодействия составляет примерно  $10^{-4}$  eV, что значительно меньше тепловой энергии, приходящейся на один атом. Но поскольку формула используется за рамками ее применимости, более точным является сравнение результатов по скорости зарождения. Результаты показывают, что значения  $J$ , рассчитанные для разных  $N$ , согласуются друг с другом в пределах ошибки расчета, и, таким образом, влияние размера системы незначительно.

Поскольку время ожидания зависит от числа атомов, использование систем двух размеров также позволило определить скорость зарождения в большем диапазоне сдвиговых напряжений. Так, в области больших напряжений использовалась система с меньшим числом атомов, а в области меньших — с большим числом.

Для всех трех температур существует сильная зависимость скорости зарождения от приложенных напряжений — изменение сдвиговых напряжений на  $1$ – $2\%$ , что приводит к изменению скорости на порядок. Подобная сильная зависимость наблюдается при МД-моделировании зарождения дислокаций в меди при деформировании с постоянной скоростью [18]. В этой работе значения сдвиговых напряжений, при которых происходит зарождения, изменяются на  $1$ – $2\%$  при изменении скорости деформирования на порядок. Такое поведение связано с сильной зависимостью энергии зарождения от сдвиговых напряжений.

### 3. Обсуждение

Скорость зарождения дислокаций можно получить на основе теории [1], в которой предполагается максвелловское распределение для зародышей дислокационных петель. В этом случае при расчете  $J$  используется свободная энергия петли частичной дислокации критического размера. В данном случае такой подход не применим, поскольку область применимости формулы для энергии ограничивается размерами зародышей, значительно большими по сравнению с размером ядра дислокации. При моделировании характерный размер



**Рис. 5.** Температурные зависимости активационной энергии  $U$  (1) и объема  $V$  (2), полученные из аппроксимации результатов МД по формуле (1).

зародыша составил 15 атомов, а радиус несколько ангстрем. Поэтому формула для энергии, описываемая в работе [1], в данном случае неприменима.

В основе другого подхода лежит следующая формула:

$$J = J_0 \exp\left(-\frac{U - \sigma V}{kT}\right), \quad (1)$$

где  $\sigma$  — сдвиговые напряжения,  $J_0$  — максимальная скорость зарождения,  $U$  — энергия зарождения,  $V$  — активационный объем, характеризующий релаксацию упругой энергии при образовании зародыша.

Формула (1) часто используется для интерпретации экспериментальных данных по скорости или вероятности возникновения зародышей пластического деформирования при наноиנדентировании (см., например, [7]). На ее основе проводится аппроксимация данных, определяются активационный объем, энергия зарождения и делается вывод о механизме пластической деформации.

Применим формулу (1) для аппроксимации МД-результатов. Рассмотрим два подхода. В первом попытаемся аппроксимировать результаты, полученные для трех температур, с помощью формулы (1), в которой будем считать параметры  $U$  и  $V$  не зависящими от  $T$ . Результаты такой обработки с помощью метода наименьших квадратов представлены кривыми 3 на рис. 4. Если полученные значения  $U = 6.67$  eV и  $V = 502 \text{ \AA}^3$  не противоречат их физическому смыслу, то значение  $J_0 \approx 10^{23} \text{ s}^{-1}$  оказалось абсурдным. Максимальную скорость зарождения  $J_0$  можно оценить по формуле из работы [1]:  $J_0 = 8\pi r\omega/b$ , где  $r$  — радиус петли,  $\omega$  — дебаевская частота,  $b$  — вектор Бюргерса. Подставляя значения величин  $r \approx 5 \text{ \AA}$ ,  $\omega \approx 10^{13} \text{ s}^{-1}$ ,  $b = 1.65 \text{ \AA}$ , получим значения  $J_0$  порядка  $10^{15} \text{ s}^{-1}$ , что на восемь порядков меньше величины, определенной из аппроксимации.

При втором подходе к использованию формулы (1) проведем аппроксимации отдельно для каждой температуры (кривые 4 на рис. 4). Величина  $V$  следует из

наклона. Поскольку при такой аппроксимации  $J_0$ ,  $U$  однозначно не определяются, в качестве  $J_0$  использовалось значение  $10^{15} \text{ s}^{-1}$ . Из рис. 5 видно, что величины  $U$  и  $V$  имеют сильную зависимость от температуры. Пренебрежение этой зависимостью приводит к неправильным значениям параметра  $J_0$  при первом варианте аппроксимации, поэтому формула (1) не может быть использована для аппроксимации первичных данных в широком диапазоне температур.

В экспериментах по наноиנדентированию на основе статистического анализа результатов с использованием формулы (1) получены значения  $J_0$ ,  $U$  и  $V$ . Для платины  $J_0 \approx 3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ,  $U \approx 0.28$  eV,  $V \approx 10.2 \text{ \AA}^3$  [7]. Для  $\text{Ni}_3\text{Al}$  величина  $V \approx 23.5 \text{ \AA}^3$ , а  $J_0$  и  $U$  получены в виде величины  $\eta = J_0 \exp(-U/kT) \approx 4.6 \cdot 10^{-20} \text{ s}^{-1}$  [8]. Экспериментальные значения активационного объема  $V$  значительно меньше величин, полученных в настоящей работе. Возможно, это связано с большей величиной модуля сдвига в рассмотренных материалах ( $\mu_{\text{Al}} = 26$  GPa,  $\mu_{\text{Pt}} = 61$  GPa,  $\mu_{\text{Ni}_3\text{Al}} = 131$  GPa). Величина  $\eta$  в обоих материалах значительно превосходит значение, полученное для гомогенного зарождения в алюминии  $\eta \approx 10^{-53} \text{ s}^{-1}$ . Это свидетельствует о значительно меньшей активационной энергии в экспериментах для Pt и  $\text{Ni}_3\text{Al}$ . Видимо, зарождение происходит негомогенно, что также отмечено авторами этих работ [7,8]. Но как при гомогенном, так и при гетерогенном механизме стохастические свойства процесса зарождения (в частности, функция распределения времен ожидания) подобны.

## 4. Заключение

Проведено исследование гомогенного зарождения дислокаций под действием сдвиговых напряжений в ГЦК-кристалле на примере алюминия. Исследованы механизм и стохастические свойства процесса зарождения, определена скорость зарождения. Получены следующие результаты.

Механизм зарождения заключается в локальном сдвиге группы атомов на вектор Бюргерса частичной дислокации вдоль плоскости скольжения. Процесс зарождения связан с термическими флуктуациями и носит пуассоновский характер. На основе распределения времен зарождения определена скорость зарождения.

С помощью прямых МД-расчетов определена зависимость скорости зарождения от сдвиговых напряжений для нескольких значений температур. Показано, что зависимость может быть аппроксимирована в рамках формулы Аррениуса при введении зависимостей энергии активации и активационного объема от температуры.

Авторы благодарны Ю.И. Головину, М.Ю. Гуткину, И.А. Овидько, Н.А. Инограмому за полезные обсуждения, а также Э.Ф. Олейнику, К.П. Зольникову и А.Ю. Куксину за интерес к работе.

Расчеты проведены на вычислительных кластерах МФТИ и МСЦ РАН.

## Список литературы

- [1] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [2] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. УФН **115**, 3 (1975).
- [3] Т. Судзуки, Х. Ёсинага, С. Такеути. Динамика дислокаций и пластичность. Мир, М. (1989). 296 с.
- [4] H. Bei, Y.F. Gao, S. Shim, E.P. George, G.M. Pharr. Phys. Rev. B **77**, 060 103 (2008).
- [5] D. Lorenz, A. Zeckzer, U. Hilpert, P. Grau, H. Johansen, H.S. Leipner. Phys. Rev. B **67**, 172 101 (2003).
- [6] Ю.И. Головин. ФТТ **50**, 2113 (2008).
- [7] S.A. Schuh, J.K. Mason, A.C. Lund. Nat. Mater. **4**, 617 (2005).
- [8] P.C. Wo, L. Zuo, A.H.W. Ngan. J. Mater. Res. **20**, 489 (2005).
- [9] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Appl. Phys. Lett. **88**, 211 901 (2006).
- [10] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. ФТТ **50**, 630 (2008).
- [11] M.Yu. Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovidko. Acta Mater. **54**, 2489 (2006).
- [12] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovidko. Acta Mater. **56**, 1642 (2008).
- [13] J. Cui, Y. Hao, S. Li, M. Sui, D. Li, R Yang. Phys. Rev. Lett. **102**, 045 503-1 (2009).
- [14] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, И.А. Овидько. ФТТ **43**, 42 (2001).
- [15] С.В. Бобылев, И.А. Овидько. ФТТ **50**, 617 (2008).
- [16] D. Tanguy, M. Mareschal, P.S. Lomdahl, T.C. Germann, B.L. Holian, R. Ravelo. Phys. Rev. B **68**, 144 111 (2003).
- [17] B. Cao, E.M. Bringa, M.A. Meyers. Met. Mater. Trans. A **38A**, 2681 (2007).
- [18] D.E. Spearot, M.A. Tschopp, D.L. McDowell. Scripta Mater. **60**, 675 (2009).
- [19] T. Zhu, J. Li, K.J. Van Vliet, S. Ogata, S. Yip, S. Suresha. J. Mech. Phys. Solids **52**, 691 (2004).
- [20] K.J. Van Vliet, J. Li, T. Zhu, S. Yip, S. Suresh. Phys. Rev. B **67**, 104 105 (2003).
- [21] S.V. Dmitriev, J. Li, N. Yoshikawa, Y. Shibutani. Phil. Mag. **85**, 2177 (2005).
- [22] M.S. Daw, M.I. Baskes. Phys. Rev. B **29**, 6443 (1984).
- [23] X.-Y. Liu, Xu Wei, S.M. Foiles, J.B. Adams. Appl. Phys. Lett. **72**, 1578 (1998).
- [24] S.J. Plimpton. J. Comp. Phys. **117** (1995).
- [25] M.A. Tschopp, D.E. Spearot, D.L. McDowell. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **15**, 693 (2007).
- [26] А.Ю. Куksин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ДАН **420**, 467 (2008).
- [27] В.С. Красников, А.Ю. Куksин, А.Е. Майер, А.В. Янилкин. ФТТ **52**, 1295 (2010).
- [28] S.G. Psakhie, K.P. Zolnikov, D.S. Kryzhevich. Phys. Lett. A **367**, 250 (2007).
- [29] G.E. Norman, V.V. Stegailov. Mol. Simul. **30**, 397 (2004).
- [30] Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов. ДАН **386**, 328 (2002).
- [31] А.У. Куksин, I.V. Morozov, G.E. Norman, V.V. Stegailov, I.A. Valuev. Mol. Simul. **31**, 1005 (2005).
- [32] В.П. Скрипов, В.П. Коверда. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. Наука, М. (1984). 232 с.
- [33] S.L. Dudarev, M.R. Gilbert, K. Arakawa, H. Mori, Z. Yao, M.L. Jenkins, P.M. Derlet. Phys. Rev. B **81**, 224 107 (2010).