

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАРОЖДЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ В ОДНОРОДНО ДЕФОРМИРОВАННОМ ГЦК-КРИСТАЛЛЕ

© С.В.Дмитриев, А.А.Овчаров, М.Д.Старостенков, Э.В.Козлов

Алтайский государственный технический университет,

656099 Барнаул, Россия

(Поступила в Редакцию 3 октября 1995 г.

В окончательной редакции 31 января 1996 г.)

В квазитрехмерной квазистатической модели с использованием периодических граничных условий проведен компьютерный эксперимент по изучению механизмов перехода однородно деформированного кристалла от бездефектного состояния к состоянию с дефектами. Показано, что структурная перестройка кристалла с ростом уровня деформации проходит в несколько этапов. На первом этапе устойчивым является расположение атомов в узлах однородно деформированной решетки. Второй этап характеризуется возникновением синусоидальных волн перемещений атомов малой амплитуды. На третьем этапе образуются дислокации основной системы скольжения, на четвертом — дислокации вторичной системы скольжения.

Моделирование процессов, происходящих в кристалле, находящемся в напряженном состоянии, может производиться на основе континуального описания или на атомном уровне. Рассматривая кристалл как непрерывную среду, невозможно адекватно описать состояние вещества в малой окрестности дефекта, а также процесс зарождения нового дефекта, связанный со структурной перестройкой. При рассмотрении подобных вопросов интерес вызывает атомарный подход. С помощью этого подхода оказывается возможным не только определить точки бифуркации процесса деформирования, но и проследить траектории движения атомов при формировании качественно нового устойчивого состояния кристаллической решетки.

При выборе компьютерной модели важно найти компромисс между всегда ограниченными возможностями вычислительной техники и степенью адекватности модели изучаемому физическому явлению. Одной из важнейших характеристик модели является размерность, которая чаще всего определяется числом степеней свободы структурных элементов кристалла. В последние десятилетия появилась возможность решать трехмерные задачи молекулярной динамики. Примером являются работы [1,2], близкие по постановке проблемы к настоящему исследованию. В [1] изучался процесс структурной перестройки кристалла алюминия под действием одноосного сжатия в направлении [001] с одновременным увеличением размеров кристалла в

направлениях [100] и [010] из условия сохранения объема. Модельный ГЦК-кристаллит содержит 500 атомов. Отмечена фрагментация кристаллита на отдельные зерна. В работе [2] на аналогичном кристаллите твердого аргона при температуре 18 К обнаружен и исследован фазовый переход ГЦК-ОЦТ в процессе сжатия в направлении [001] с одновременным расширением в других направлениях так, чтобы удовлетворить условию одноосного сжатия. Появления дислокаций авторами этих работ не отмечается, хотя достигались весьма значительные уровни деформации. Это, по-видимому, связано с малым объемом кристаллита, сопоставимым с минимально возможными размерами дислокационной петли, что затрудняет либо возникновение такого типа дефектов, либо их идентификацию.

При трехмерной постановке весьма ограниченным является не только объем кристаллита, но и исследуемый отрезок времени. Это заставляет искать более эффективные способы описания кристаллита, позволяющие при тех же ресурсах ЭВМ исследовать поведение дислокаций. Имеется большое количество результатов, касающихся поведения дислокаций в двумерных гексагональных кристаллах [3,4] и даже в одномерных моделях кристалла типа Френкеля-Конторовой. Однако геометрия двумерной гексагональной решетки такова, что дислокации обладают весьма специфическими свойствами, достаточно далекими от свойств дислокаций в реальных кристаллах [4].

Существует промежуточный вариант — квазитрехмерная модель, более близкая к реальному кристаллу, чем двумерная, но предъявляющая лишь незначительно большие требования к ресурсам ЭВМ. Здесь структурной единицей кристалла выступает бесконечная прямолинейная атомная цепочка, внутри которой атомы не смещаются друг относительно друга, но цепочка имеет три степени свободы. Ориентация цепочек выбирается в соответствии с направлением приложения нагрузки с целью обеспечения минимального влияния их недеформируемости. В рамках этой модели решалась, например, задача о разрыве кристалла с образованием и распространением трещины [5]. Этот подход используется и в настоящей работе.

Следующим важным упрощением, принятым в предлагаемой работе, являлась замена уравнений молекулярной динамики на уравнения квазистатики. Другими словами, к силам межмолекулярного взаимодействия добавлялись столь значительные силы вязкого трения, что инерционным слагаемым можно было пренебречь.

При компьютерных исследованиях свойств дислокаций последние зачастую моделируются следующим образом: в соответствии с точными решениями теории упругости и задаются перемещения атомов, а затем прослеживается релаксация получившейся конфигурации, что позволяет уточнить положения атомов в области ядра дислокации. Такой подход использовался, например, в [6], где в ГЦК-кристаллах Ag и Xe получены атомные конфигурации в ядре винтовой дислокации. В данной работе преследовалась цель проследить всю цепочку трансформаций равновесных состояний кристалла при возрастающей деформации, начиная от бездефектного состояния, до возникновения дислокаций.

Эксперимент проводился по следующей схеме. Идеальный ГЦК-кристалл представлялся в виде совокупности недеформируе-

мых атомных цепочек ориентации  $[1\bar{2}1]$ . По известному потенциалу Леннарда-Джонса (6,12) с параметрами для твердого аргона [7] табулировался потенциал взаимодействия между цепочками, причем таблица оказывалась двумерной, поскольку взаимодействие между парой цепочек зависит как от расстояния между ними, так и от их относительного осевого сдвига. Радиус обрезки потенциала располагался между девятой и десятой координационными сферами, т.е. каждый атом взаимодействовал с 164 соседями. В действительности потенциал Леннарда-Джонса значительно более короткодействующий, однако введение такого дальнего действия оправдано, поскольку структурная перестройка кристалла приводит к большому относительному перемещению атомных цепочек, и в результате цепочки, бывшие на значительном расстоянии друг от друга в недеформированном кристалле, могут оказаться достаточно близкими.

Расчетная область имела вид параллелепипеда с одним бесконечным ребром вдоль направления  $[1\bar{2}1]$  и гранями, имеющими ориентации  $(111)$  и  $(\bar{1}01)$ . Размер области составлял 24 межплоскостных расстояния  $(111)$  и 100 межплоскостных расстояний  $(\bar{1}01)$ . Использовались периодические граничные условия. Ось  $OZ$  декартовой системы координат направлялась вдоль бесконечного ребра, ось  $OX$  была перпендикулярна плоскостям  $(\bar{1}01)$ , а  $OY$  — плоскостям  $(111)$ .

Блок подвергался комбинации однородных деформаций сжатия в направлении оси  $OY$  (деформация  $\varepsilon_y$  отрицательна) и сдвига (деформация  $\varepsilon_{xy}$  положительна). Абсолютные значения деформаций  $\varepsilon_y$  и  $\varepsilon_{xy}$  были одинаковыми. Третья компонента тензора плоской деформации, а именно растяжение в направлении оси  $OX$ , полагалась равной нулю. Деформация образца увеличивалась с шагом 0.05%. После каждого приращения деформации осуществлялась квазистатическая релаксация кристалла вплоть до достижения равновесного состояния. Критерий достижения состояния равновесия основан на вычислении максимальной по модулю силы, действующей на атомные цепочки. Если эта сила не превышала некоторого малого значения, то равновесие считалось достигнутым, в противном случае релаксация продолжалась. Таким образом, кристалл проводился через ряд равновесных состояний, отвечающих возрастающим значениям деформации.

Получены следующие результаты. При деформациях от 0 до 4% кристалл вел себя устойчиво, атомы не проявляли тенденции к уходу от положений, отвечающих узлам однородно деформированной решетки. Для проверки кристалла на устойчивость атомным цепочкам задавались смещения их из решеточных положений в случайном направлении на расстояние 0.1% от параметра решетки. В указанном диапазоне деформаций эти возмущения положений атомов в результате релаксации исчезали.

Значение деформации 4% соответствует первой точке бифуркации процесса нагружения кристалла. Атомы уходят от решеточных положений и после релаксации до достижения равновесного состояния, в кристалле возникают синусоидальные волны атомных смещений, причем вдоль каждого координатного направления укладывается по одной волне синусоиды. Амплитуда волн весьма мала (порядка  $10^{-6}$  параметра решетки). При дальнейшем увеличении деформации амплитуда волн быстро возрастает, и при уровне деформации 5.6% процесс про-

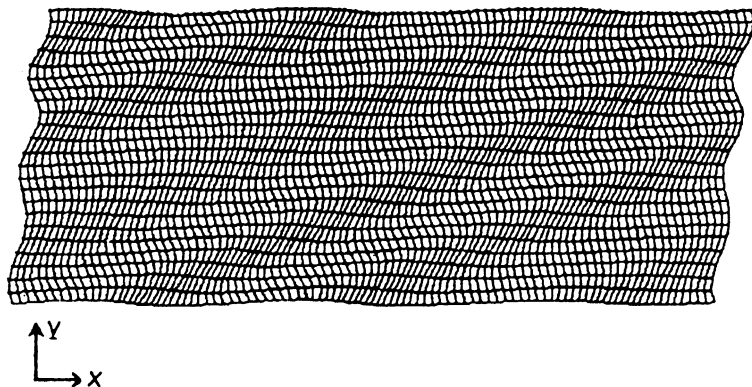


Рис. 1. Конфигурация кристалла после релаксации до достижения равновесного состояния при уровне деформации 5.8%.

Перемещения атомных цепочек от равновесных положений увеличены в 1000 раз.

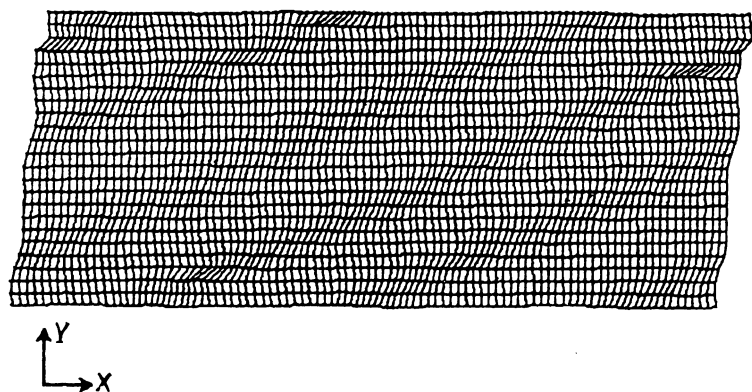
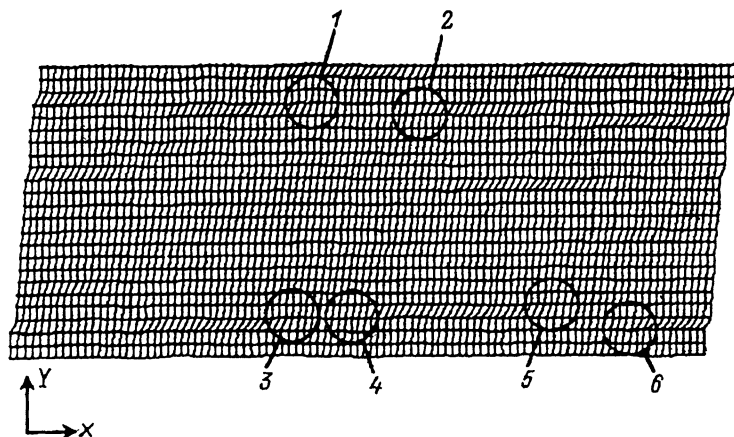


Рис. 2. Неравновесная конфигурация кристалла при уровне деформации 5.9%.

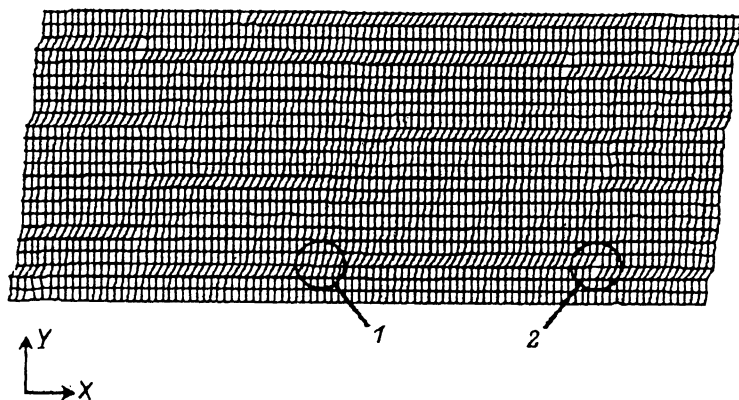
Перемещения атомных цепочек от равновесных положений увеличены в 4 раза.

ходит через следующую точку бифуркации, что приводит к уменьшению длины волны. Теперь на ячейке периодичности укладываются три длины волны перемещений атомных цепочек, и их амплитуда быстро растет с увеличением деформации. На рис. 1 показана конфигурация кристалла при уровне деформации 5.8%. Перемещения атомов увеличены в 1000 раз для того, чтобы сделать их заметными.

При уровне деформации 5.9% волны перемещений атомных цепочек становятся неустойчивыми. Критическое значение амплитуды волны перемещений составляет порядка  $10^{-3}$  параметра решетки. С этого момента в кристалле начинается новая, более значительная, перестройка структуры. На рис. 2-4 прослеживаются стадии этой перестройки, происходящей в кристалле самопроизвольно, при неизменной деформации 5.9%. Первоначально происходит обмен энергиями между гребнями волн перемещений. Амплитуда некоторых гребней уменьшается, за счет чего амплитуда других возрастает, и в этой области формируются прообразы будущих дислокационных петель. Эти процессы хорошо видны на рис. 2, где перемещения атомов увеличены в 4 раза. На



**Рис. 3.** Неравновесная конфигурация кристалла при уровне деформации 5.9%. Разноименные дислокации 1 и 2 скользят в одной плоскости, в дальнейшем произойдет их аннигиляция. Пары дислокаций 3, 4 и 5, 6 скользят в соседних плоскостях, в результате произойдет их аннигиляция с образованием междуузельной и вакантной атомных цепочек соответственно.



**Рис. 4.** Конфигурация кристалла после релаксации до достижения равновесного состояния при уровне деформации 5.9%. Цифрами 1 и 2 отмечены междуузельная и вакантная атомные цепочки соответственно.

рис. 3 показана стадия, на которой уже сформировались петли краевых дислокаций, отвечающие основной системе скольжения по плотноупакованным плоскостям (111). На рис. 3, 4 перемещения атомных цепочек сопоставимы с параметром решетки и приводятся без увеличения. Поскольку в данной модели дислокации прямолинейны и бесконечны, то под дислокационной петлей понимается пара разноименных дислокаций. Образующиеся дислокации скользят в направлении  $\pm[101]$ , причем дислокации одного знака движутся вдоль оси  $OX$ , а другого — в противоположном направлении. Эти дислокации частичные с вектором Бюргера  $a/6[121]$ . Пробегая по кристаллу, они создают дефекты упаковки. Если в одной плоскости рождается более одной пары дислокаций, то они в процессе движения сталкиваются и аннигилируют. Примером являются дислокации 1 и 2, выделенные на рис. 3. Если дис-

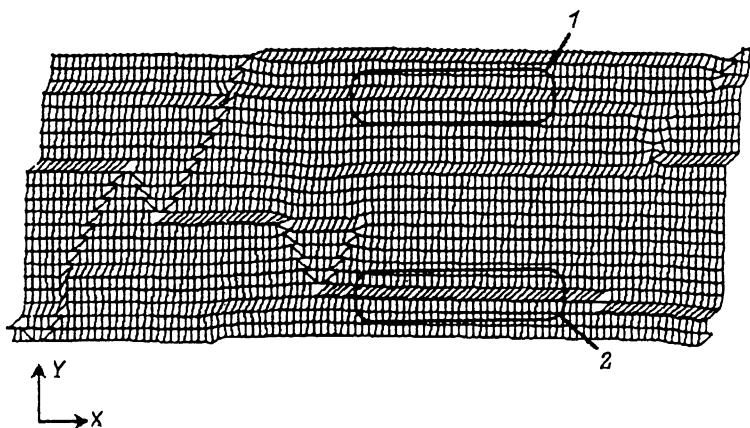


Рис. 5. Конфигурация кристалла после релаксации до достижения равновесного состояния при уровне деформации 7.4%.

Цифрой 1 показан дефект упаковки, возникший в результате прохождения по кристаллу частичной дислокации, цифрой 2 — область с восстановленной вторичным прохождением частичной дислокации ГЦК-структурой.

локации скользят в соседних плоскостях, то они аннигилируют путем переползания с образованием либо вакантных, либо междоузельных цепочек. Например, пара дислокаций 3 и 4, отмеченных на рис. 3, проаннигилирует с образованием междоузельной цепочки, а пара 5 и 6 — с образованием вакантной цепочки. Если плоскости скольжения взаимодействующих дислокаций отстоят более чем на одно межплоскостное расстояние, то они образуют дислокационные диполи и более сложные уравновешенные конфигурации. Интересно, что на этом этапе перестройки структуры можно говорить не только о релаксации атомных цепочек, но и о релаксации в дислокационной подсистеме, когда дислокации зарождаются, движутся, аннигилируют либо образуют диполи. На рис. 4 показана срелаксированная структура кристалла при уровне деформации 5.9%. Здесь уравновешены силы взаимодействия не только между атомными цепочками, но и между оставшимися в кристалле дислокациями. Цифрами 1 и 2 отмечены междоузельная и вакантная цепочки соответственно.

Рост деформации, начиная с уровня 5.9% до 6.3%, приводит к возникновению новых дислокаций основной системы скольжения и к релаксации дислокационной подсистемы по тем же каналам: их движению, аннигиляции или созданию уравновешенных комплексов.

С уровня деформации 6.3% и выше в кристалле возникают петли краевых дислокаций вторичной системы скольжения. Их плоскость скольжения —  $(012)$ , направление скольжения —  $[52\bar{1}]$ . Краевые дислокации обеих систем скольжения движутся и аннигилируют, производя существенные перестройки атомной структуры кристалла. На рис. 5 показана равновесная конфигурация кристалла при уровне деформации 7.4%.

Проведенное исследование помимо чисто научного может иметь и прикладное значение, связанное с изучением поведения под нагрузкой бездефектных нитевидных кристаллов, являющихся наполнителем современных композиционных материалов. Несмотря на то что заро-

ждение дислокаций в нитевидных кристаллах происходит вблизи поверхности [8], на упругом участке их диаграммы растяжения имеются изломы [9], что может быть связано с прохождением некоторых точек бифуркации до момента возникновения дислокаций. Например, в кристалле, подверженном одноосному растяжению, могут возникнуть сдвиговые компоненты деформации. В работе [10] аналитически показана возможность потери устойчивости растягиваемого нитевидного кристалла с образованием синусоидальных волн сдвиговой деформации.

Так образом, в работе показано, что дислокации могут возникать и в бездефектных кристаллах, хотя их появление происходит при значительных уровнях деформации. Формированию дислокаций предшествует последовательность бифуркаций процесса деформирования кристалла, сводящихся к появлению волн перемещений атомных цепочек малой амплитуды, а затем к скачкообразному уменьшению их длины волны и быстрому росту амплитуды. Квазитрехмерная модель кристалла является более жесткой, чем трехмерная, поэтому полученный в расчетах критический уровень деформации 5.9%, при котором появляются дислокации, является завышенным.

#### Список литературы

- [1] Шудегов В.Е., Журавлев В.А., Лихачев В.А., Бычков Д.А., Чуудинов В.Г. Физика и механика новых материалов. Ижевск (1992). С. 4.
- [2] Ray J.R., Rahman A. *Physica* **B150**, 250 (1988).
- [3] Мелькер А.И., Иванов А.В. Изв. АН СССР. Металлы, *6*, 128 (1987).
- [4] Duesbery M.S., Joobs B. *Phyl. Mag.* **A54**, 2, 145 (1986).
- [5] Кирсанов В.В. ФММ, *8*, 51 (1991).
- [6] Kogure Y., Tsuchiya T., Niki Y. *J. Phys. Soc. Jap.* **56**, 3, 989 (1987).
- [7] Харрисон У. Теория твердого тела. М. (1972).
- [8] Бережкова Г.В. Нитевидные кристаллы. М. (1969). 158 с.
- [9] Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. М. (1972). 408 с.
- [10] Дмитриев С.В., Науман Л.В., Старостенков М.Д., Васильев А.А. *Металлофизика и новейшие технологии* **17**, 4, 56 (1995).