

Динамика краевых дислокаций в двумерном кристалле при конечных температурах

© Ю.А. Баимова, С.В. Дмитриев, А.А. Назаров, А.И. Пшеничнюк

Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук,
Уфа, Россия

E-mail: dmitriev.serгей.v@gmail.com

(Поступила в Редакцию 1 сентября 2008 г.

В окончательной редакции 11 января 2009 г.)

Методом молекулярной динамики изучаются скольжение и аннигиляция краевых дислокаций в двумерной гексагональной решетке при различных температурах. Полученные данные используются для определения коэффициентов феноменологического уравнения движения дислокаций, обладающих инерцией и испытывающих торможение за счет взаимодействия с фононами.

Работа поддержана грантами РФФИ № 09-08-00695-а, 07-08-12152, 08-02-91316-ИНД_а, грантом Академии наук Башкирии „Поволжье“ № 40/61-П и грантом фонда „Интелс“ (Магнитогорск).

PACS: 61.72.Bb, 83.10.Rs

1. Введение

Поведение дислокаций в кристаллических телах определяет многие их свойства, такие как пластичность, внутреннее трение и др. [1–5]. Для описания поведения дислокаций в твердом теле широко используется метод дискретной дислокационной динамики (ДДД) как в двумерной, так и в трехмерной постановке [6–11]. В недавних работах модель ДДД была дополнена введением дисклинационных полей [12–14]. Хотя метод ДДД является мощным инструментом для моделирования динамики достаточно больших систем дислокаций, он не в полной мере отражает характер взаимодействия дислокаций, так как лежащие в его основе аналитические решения теории упругости не в состоянии описать структуру ядра дислокации. Метод молекулярной динамики (МД) позволяет моделировать системы, содержащие небольшое количество дислокаций, и дает возможность описать движение дислокаций с учетом атомарного строения их ядер [15–17]. Это позволяет с микроскопических позиций и с учетом влияния температуры детально изучить дислокационные реакции, такие как аннигиляция и зарождение дислокаций, создание дислокационных диполей, взаимодействие дислокаций с препятствиями. Метод МД позволяет определить феноменологические соотношения, которые затем могут быть использованы в методе ДДД для более точного описания микроскопических дислокационных явлений. Известны попытки использования гибридных расчетных схем, сочетающих достоинства континуального и атомистического подходов [18–20]. Получил развитие и другой подход, когда формулировка правил, описывающих поведение дислокаций в методе ДДД, в том числе и дислокационные реакции, основывается на атомистическом моделировании [21]. Именно этот подход развивается в настоящей работе.

Поведение дислокаций в кристаллах должно описываться трехмерными моделями, однако многие эффекты, включая неустойчивость однородного распределения

дислокаций и формирование различных дислокационных структур, могут быть качественно изучены в более простых двумерных моделях (см., например, [8,12,13]). Мы отталкиваемся от работ по ДДД-моделированию процессов образования дислокационных структур в двумерной постановке [6–8], в которых было показано, что эти процессы существенно зависят от числа систем скольжения, учета или неучета переползания дислокаций и ряда других факторов. В этих и целом ряде других работ моделируемая среда считается изотропной, что упрощает расчет сил взаимодействия между дислокациями. Таким образом, представляется интересным рассмотрение дислокаций в двумерной гексагональной решетке, которая обладает свойством изотропии. Метод МД применяется нами для определения феноменологических закономерностей динамики краевых дислокаций в двумерной гексагональной решетке с атомами, взаимодействующими посредством потенциала Леннарда–Джонса. В частности, определены эффективная масса дислокации, температурная зависимость коэффициента фоновой вязкости при скольжении дислокаций. Получены зависимости параметра решетки кристалла и его упругих констант от температуры.

2. Описание модели

Рассматривалась двумерная гексагональная решетка, примитивная ячейка которой опирается на векторы трансляции $\mathbf{w}_1 = (a, 0)$, $\mathbf{w}_2 = (a/2, a\sqrt{3}/2)$, где a — параметр решетки. Пронумеруем узлы решетки целыми числами m, n . Радиус-вектор узла m, n будет иметь вид $\mathbf{r}_{m,n} = m\mathbf{w}_1 + n\mathbf{w}_2$. Решетка может подвергаться однородной деформации общего вида с компонентами ε_{xx} , ε_{yy} , ε_{xy} . Порождающие векторы деформированной решетки будут $\mathbf{p}_1 = \mathbf{w}_1 + \mathbf{w}_1\mathbf{H}$, $\mathbf{p}_2 = \mathbf{w}_2 + \mathbf{w}_2\mathbf{H}$, где коэффициенты матрицы \mathbf{H} имеют вид $h_{11} = \varepsilon_{xx}$, $h_{12} = h_{21} = \varepsilon_{xy}$, $h_{22} = \varepsilon_{yy}$.

В идеальном кристалле все узлы решетки заняты атомами. Для атома m, n вводится вектор его смещения от решеточного положения $\mathbf{d}_{m,n} = (d_{x,m,n}, d_{y,m,n})$. Таким образом, радиус-вектор атома m, n можно представить в виде $\mathbf{r}_{m,n} = m\mathbf{p}_1 + n\mathbf{p}_2 + \mathbf{d}_{m,n}$.

В задачи данного исследования не входило рассмотрение какого-либо конкретного материала, поэтому нами был выбран классический парный межатомный потенциал Леннарда–Джонса. Для того чтобы избежать скачка энергии при неизбежной обрезке потенциала, он был дополнен полиномиальной функцией, обеспечивающей гладкое обращение потенциала в нуль:

$$\varphi = \begin{cases} \varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6], & 0 < r < r_{LJ}, \\ A(r - r_c)^5 + B(r - r_c)^4 + C(r - r_c)^3, & r_{LJ} \leq r < r_c, \\ 0, & r \geq r_c, \end{cases} \quad (1)$$

где r_c — радиус обрезки, а r_{LJ} — радиус обрезки потенциала Леннарда–Джонса. Коэффициенты полиномиальной функции в (1) определялись из условий непрерывности функции φ и ее первой и второй производных в точке $r = r_{LJ}$. Кроме того, очевидно, что при $r = r_c$ выполнены следующие условия: $\varphi(r_c) = 0$, $\varphi'(r_c) = 0$, $\varphi''(r_c) = 0$. Потенциал (1) обращается в нуль при $r = \sigma$ и достигает минимума $\varphi_{\min} = \varepsilon$ при $r = 2^{1/6}\sigma$.

Мы измеряем расстояние в единицах σ , энергию в единицах ε , а массу в единицах m , где m — масса атома. Тогда скорость измеряется в единицах $\sqrt{\varepsilon/m}$, время — в единицах $\sigma\sqrt{m/\varepsilon}$, а напряжения и модули упругости — в единицах ε/σ^3 . Температура d -мерной системы (в нашем случае $d = 2$) может быть определена из выражения $(d/2)Nk_B T = (1/2)\sum_{n=1}^N \langle mv_n^2 \rangle$, где N — это число атомов в системе, $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K — постоянная Больцмана; $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по времени. В дальнейшем T будет измеряться в единицах ε/k_B .

Без потери общности мы принимали $\sigma = 1$, $\varepsilon = 0.25$, $m = 10$. Радиусы обрезки были равны $r_{LJ} = 2.4$, $r_c = 3.9$.

Равновесный параметр решетки при нулевой температуре для данного потенциала равен $a_0 = 1.1117$. Для кристалла с равновесным параметром решетки при $T = 0$ были определены упругие константы: коэффициент Пуассона $\nu_0 = 1/3$, модуль сдвига $\mu_0 = 7.102$.

Расчетная ячейка, имеющая форму правильного ромба, включала 256×256 атомов, т.е. ее объем определялся векторами $\mathbf{P}_1 = 256\mathbf{p}_1$, $\mathbf{P}_2 = 256\mathbf{p}_2$. Использовались периодические граничные условия. Рассматриваемая гексагональная решетка обладает свойством изотропии и имеет три системы скольжения. В расчетную область путем относительного сдвига атомных плоскостей вводилась пара краевых дислокаций противоположного знака, находящихся в одной плоскости скольжения (рис. 1). После релаксации системы исследовалась динамика дислокаций при заданной температуре, при том что начальное расстояние между дислокациями равнялось 110 межатомным расстояниям. В системе поддерживались нулевые внешние напряжения за счет изменения деформации расчетной ячейки.

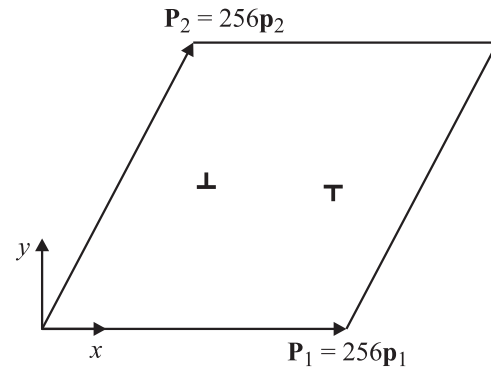


Рис. 1. Схематическое изображение двух дислокаций противоположного знака в расчетной ячейке.

Для введения температуры в начальный момент времени задавались смещения атомов из их положений равновесия, при этом начальные скорости атомов равнялись нулю. Интересующие нас параметры определялись после достижения системой термодинамического равновесия, о чем можно было судить по отсутствию дрейфа с течением времени таких макроскопических параметров, как компоненты тензора деформации расчетной ячейки (или действующих напряжений), а также кинетической (или потенциальной) энергии расчетной ячейки.

3. Результаты моделирования

Температура является весьма существенным фактором, определяющим динамику дислокаций. Прежде всего рост температуры приводит к росту фоновой вязкости, тормозя скольжение дислокаций, но облегчает их переползание за счет роста концентрации и подвижности точечных дефектов. Температура также влияет на упругие константы материала, а следовательно, на силы взаимодействия между дислокациями, которые определяются полями упругих напряжений.

Далее мы приводим оценку влияния температуры на параметр решетки и упругие константы 2D-кристалла, а затем изучаем скольжение пары дислокаций противоположного знака в расчетной ячейке при разных температурах с целью определения эффективной массы дислокации и коэффициента фоновой вязкости.

3.1. Зависимость параметра решетки и упругих констант от температуры. Для расчета температурной зависимости параметра решетки размер расчетной ячейки изменялся по методу Паринелло–Рамана с целью моделирования нулевых внешних напряжений. По объемной деформации ячейки $\varepsilon = (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/2$ рассчитывалось значение параметра решетки при данной температуре $a = a_0(1 + \varepsilon)$. Для исследованного нами интервала малых температур $T \leq 0.02$ было найдено, что изменение параметра решетки с температурой с большой точностью описывает-

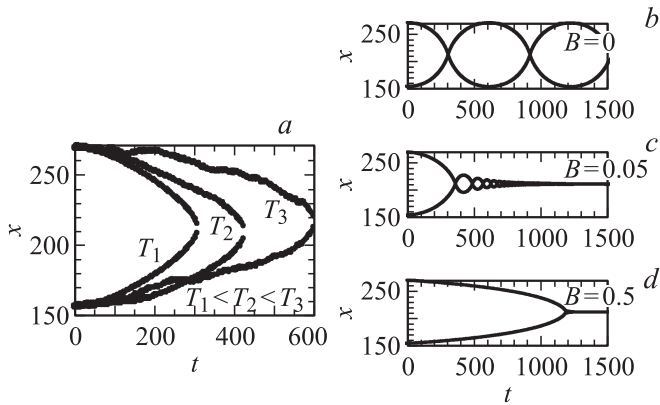


Рис. 2. Зависимости x -координат для рассматриваемой пары разноименных дислокаций от времени при температурах $T_1 = 3 \cdot 10^{-4}$, $T_2 = 0.0096$, $T_3 = 0.015$ (а) и траектории движения дислокаций, полученные численным интегрированием уравнения (6) при $M = 10.95$ и различных значениях коэффициента фоновой вязкости B (b–d).

ся линейной зависимостью

$$a = a_0 + \alpha T, \quad (2)$$

где $\alpha = 0.3348$.

Для расчета модуля сдвига μ при заданной температуре сдвиговая деформация расчетной ячейки ε_{xy} выбиралась такой, чтобы действующее сдвиговое напряжение было равно заданной малой величине $\sigma_{xy} = 0.01$. Тогда из закона Гука $\mu = \sigma_{xy} / \varepsilon_{xy}$. Для малых температур $T \leq 0.02$ с хорошей точностью справедлива линейная зависимость модуля сдвига от температуры:

$$\mu = \mu_0 + \beta T, \quad (3)$$

где $\beta = -42.1$.

Для расчета объемного модуля при заданной температуре объемная деформация расчетной ячейки $\varepsilon = (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/2$ выбиралась такой, чтобы действующее объемное напряжение $\sigma = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$ было равно заданной малой величине $\sigma = 0.01$. При этом сдвиговые компоненты деформации и напряжения были равны нулю. Тогда для объемного модуля имеем $B = \sigma / \varepsilon$. Было найдено, что для малых температур $T \leq 0.02$ можно принять

$$B = B_0 + \gamma T, \quad (4)$$

где $B_0 = 28.41$, $\gamma = -215.0$.

Коэффициент Пуассона может быть рассчитан с использованием (3) и (4) следующим образом:

$$\nu = \frac{2B - 2\mu}{2(2B + \mu)}. \quad (5)$$

3.2. Скольжение дислокаций при различных температурах. На рис. 2,а в качестве примера показаны типичные зависимости x -координат для рассматриваемой пары разноименных дислокаций от времени при разных температурах, полученные методом молекулярной динамики. Как видно из рисунка, с увеличением температуры время, необходимое для аннигиля-

ции дислокаций, увеличивается, а движение дислокаций становится более хаотическим за счет возрастающего влияния тепловых колебаний решетки.

Результаты, подобные представленным на рис. 2,а, были получены для различных температур в диапазоне $0 \leq T \leq 0.02$, и для каждого эксперимента (их общее число составило около 200) было найдено время до аннигиляции дислокаций t_{ann} .

4. Феноменологическое описание скольжения дислокаций

Феноменологическое уравнение, определяющее скольжение дислокации, имело следующий вид:

$$M\ddot{x} + B\dot{x} = F, \quad (6)$$

где $x(t)$ определяет положение дислокации в момент времени t , M — эффективная масса дислокации, которая предполагается не зависящей от температуры, $B(T)$ — температурно-зависимый коэффициент фоновой вязкости [2], $F = b\tau$ — сила Пича-Келера, действующая на единицу длины дислокации ($b = a$ — модуль вектора Бюргерса, а τ — сдвиговое напряжение, действующее в плоскости скольжения рассматриваемой дислокации). Для расчета τ использовалось известное решение теории упругости для поля напряжений, созданных прямолинейной стенкой краевых дислокаций [1] (детали расчета представлены в работе [22]).

Для определения эффективной массы дислокации M , входящей в феноменологическое уравнение (6), методом МД было определено время аннигиляции двух дислокаций при нулевой температуре. В этом случае $B = 0$ и значение M было найдено из условия, что интегрирование уравнения (6) дает то же время аннигиляции, что и МД-расчет. При этом, естественно, начальные положения двух дислокаций в ячейке периодичности брались теми же, что и в МД-расчетах, а именно: $x_0 = \pm 56a$, а начальные скорости дислокаций равнялись нулю. Для найденного значения массы $M = 10.95$ путем численного интегрирования уравнения (6) рассчитывались траектории движения дислокаций при различных коэффициентах фоновой вязкости B . Примеры таких расчетов приведены на рис. 2, b–d, причем для случая, когда упругие константы считались не зависящими от температуры. Время первого столкновения дислокаций считалось временем их аннигиляции.

Остановимся подробнее на сравнении динамики дислокаций в МД-расчетах и в расчетах из феноменологического уравнения (6). Основным различием траекторий дислокаций, представленных на рис. 2,а (МД-метод) и на рис. 2, b–d (феноменология), является то, что в МД-расчетах дислокации аннигилируют после первого столкновения даже при нулевой температуре, т.е. при $B = 0$, в то время как уравнение (6) описывает затухающий (при $B > 0$) колебательный процесс для рассматриваемой пары дислокаций с их многократным

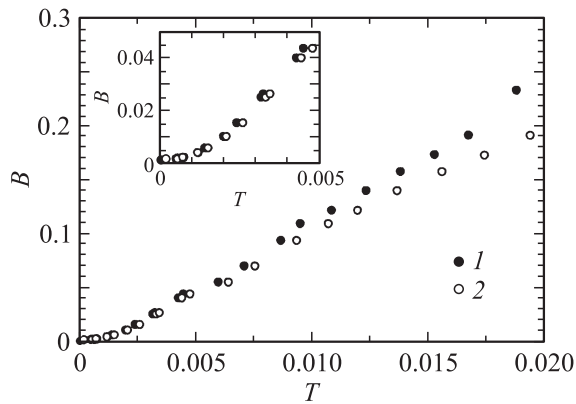


Рис. 3. Коэффициент фонной вязкости как функция температуры без учета (1) и с учетом (2) температурной зависимости упругих констант. На вставке — начальные участки зависимостей $B(T)$ в увеличенном масштабе.

столкновением. Это различие объясняется тем, что уравнение (6) не учитывает микроскопического строения ядер дислокаций и возможности их аннигиляции при столкновении. В ДДД-расчетах эта трудность обходится с помощью предположения, что дислокации, сблизившиеся на достаточно малое расстояние, аннигилируют, и они удаляются из системы.

Нами были получены времена аннигиляции пары дислокаций, найденные из уравнения (6) для различных B , как без учета, так и с учетом зависимостей упругих констант от температуры, определяемых соотношениями (3)–(5). При сопоставлении этих данных с данными по времени аннигиляции, полученными методом МД, была установлена температурная зависимость $B(T)$, которая приведена на рис. 3 без учета (1) и с учетом температурной зависимости упругих констант (2).

5. Заключение

Методом МД были изучены скольжение и аннигиляция пары краевых дислокаций в 2D-кристалле при разных температурах.

Обработана методика нахождения коэффициентов феноменологического уравнения, описывающего скольжение под действием сдвигающего напряжения $\tau(x)$ дислокации, имеющей эффективную массу M и испытывающей вязкое торможение за счет взаимодействия с фононами. Параметры модели подгонялись путем сравнения времени аннигиляции пары дислокаций с аналогичными данными, полученными в МД-расчетах. Были определены масса дислокации M и температурная зависимость коэффициента фонной вязкости $B(T)$ в области низких температур $0 \leq T \leq 0.02$.

Согласно теоретическим оценкам [2], $B \sim T^3$ при малых T и $B \sim T$ при высоких T . Наши данные (рис. 3) согласуются с теоретическими. Кубическая зависимость $B(T)$ отмечается при $T < 0.004$, а линейная — при $T > 0.006$.

С учетом данных по влиянию температуры на упругие константы можно оценить влияние температуры на силу взаимодействия дислокаций. Температурно-зависимый множитель, определяющий силу Пича-Келера, имеет вид $\mu/(1-\nu)$ [1]. Используя соотношения (3)–(5), находим, что при максимальной исследованной температуре $T = 0.02$ этот множитель равен 9.309, в то время как при $T = 0$ он равен 10.653. Таким образом, сдвиговое напряжение при $T = 0.02$ оказывается на 12.6% меньше по сравнению с его значением при нулевой температуре.

Учет влияния температуры на упругие константы привел к изменению оценки коэффициента фонной вязкости (рис. 3) — к снижению оценочного значения примерно на 20%.

Целью дальнейшего исследования является применение полученных данных о феноменологии свойств дислокаций для развития метода ДДД.

Список литературы

- [1] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций / Под ред. Э.М. Надгорного, Ю.А. Осипяна. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [2] Т. Судзуки, Х. Ёсинага, С. Такеути. Динамика дислокаций и пластичность. Мир, М. (1989). 296 с.
- [3] А.Н. Орлов. Введение в теорию дефектов в кристаллах. Высш. шк., М. (1983). 144 с.
- [4] L.M. Zubov. Nonlinear theory of dislocations & disclinations in elastic bodies. Springer, Berlin (2001). 205 p.
- [5] Dislocations in solids / Ed. E.R.N. Nabarro. Elsevier, Amsterdam. V. 1–14.
- [6] E. Van der Giessen, A. Needleman. Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **3**, 689 (1995).
- [7] A.N. Gulloughlu, C.S. Hartley. Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **1**, 1 (1992).
- [8] B. Bako, I. Groma, G. Gyorgyi, G. Zimanyi. Comput. Mater. Sci. **38**, 22 (2006).
- [9] R.J. Amodeo, N.M. Ghoniem. Phys. Rev. B **41**, 6958 (1990).
- [10] M.C. Fivel. C.R. Physique **9**, 427 (2008).
- [11] A. Hartmaier, P. Gumbsch. J. Comput. Aid. Mater. Des. **6**, 145 (1999).
- [12] Г.Ф. Сарафанов. Письма в ЖТФ **24**, 8, 42 (1998).
- [13] Г.Ф. Сарафанов. ФТТ **43**, 1041 (2001).
- [14] К.Н. Микаелян, М. Seefeldt, М.Ю. Гуткин, Р. Klimanek, А.Е. Романов. ФТТ **45**, 2002 (2003).
- [15] D.L. Olmsted, L.G. Hector, Jr., W.A. Curtin. J. Mech. Phys. Sol. **54**, 1763 (2006).
- [16] S. Ando, K. Takashima, H. Tonda. Mater. Trans. JIM **37**, 319 (1996).
- [17] M. Koyanagi, K. Ohsawa, E. Kuramoto. J. Nucl. Mater. **271–272**, 205 (1999).
- [18] C. Denoual. Phys. Rev. B **70**, 024 106 (2004).
- [19] S. Qu, V. Shastry, W.A. Curtin, R.E. Miller. Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **13**, 1101 (2005).
- [20] P. Gumbsch, G.E. Beltz. Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **3**, 597 (1995).
- [21] E.M. Martinez, J. Marian, A. Arsenlis, M. Victoria, J.M. Perlado. J. Mech. Phys. Sol. **56**, 869 (2008).
- [22] Ю.А. Баимова, С.В. Дмитриев, А.А. Назаров, А.И. Пшеничнюк. Фундам. пробл. соврем. материаловедения **2**, 66 (2008).