07

Дислокационно-кинетическая модель формирования дислокационной структуры при распространении интенсивной ударной волны в нанокристаллическом материале

© Г.А. Малыгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия E-mail: malygin.ga@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 20 ноября 2014 г.)

Обсуждается теоретически дислокационно-кинетическая модель формирования и распространения в нанокристаллическом материале (размер зерен 1–100 nm) ударных пластических волн в диапазоне давлений 1–50 GPa. Основой модели служит нелинейное уравнение реакционно-диффузионного типа для плотности дислокаций, включающее в себя процессы размножения, аннигиляции и диффузии дислокаций с учетом сильного поглощения дислокаций границами нанозерен. Получено решение этого уравнения в виде бегущей с постоянной скоростью волны плотности дислокаций и найдены зависимости плотности дислокаций и ширины дислокационного фронта от размера нанозерен и давления в волне. Сравнение найденных зависимостей с имеющимися в литературе результатами экспериментов и молекулярно-динамического моделирования ударно-деформируемых нанокристаллических материалов показывает хорошее их количественное согласие.

1. Введение

Нанокристаллические и наноструктурированные материалы обладают высокой прочностью (высоким сопротивлением пластической деформации) и являются в настоящее время предметом многочисленных исследований [1-3], в том числе и в условиях динамического воздействия на них ударными волнами сжатия большой интенсивности [4-9]. Имеющиеся сейчас электронно-микроскопические данные [6-9] показывают, что при размерах нанозерен 5-100 nm и давлениях в ударной волне 10-50 GPa (скоростях деформации выше 10⁷ s⁻¹) плотность дислокаций в нанокристаллических Си [6,7], Ni [8] и Fe [9] достигает 10¹⁶-10¹⁷ m⁻². Вблизи верхней границы указанного диапазона размеров зерен преобладают полные дислокации, а у нижней границы дислокационная структура состоит преимущественно из частичных дислокаций Шокли. В металлах с низкими значениями энергии дефектов упаковки (Cu [10], сплав Ni-W [10]) в диапазоне размеров зерен меньше 10-20 nm деформационная структура состоит главным образом из нанодвойников. Как и в условиях квазистатической деформации [11], при величине зерен $d < 100 \,\mathrm{nm}$ образование ячеистой дислокационной структуры в наноматериалах при ударе не наблюдается.

В настоящее время наряду с реальными физическими экспериментами распространение получили виртуальные эксперименты по исследованию деформационного поведения нанокристаллических материалов методом молекулярно-динамического (МД) моделирования в условиях ударного их нагружения [5–9]. Эксперименты по МД-моделированию показали, что при ударном воздействии на нанокристаллический материал основным механизмом деформации, как и при квазистатических скоростях деформации $10^{-4}-10^2 \, {\rm s}^{-1}$ [10], является эмиссия полных или частичных дислокаций из границ и стыков зерен и их поглощение границами. Эмиссия и поглощение границами дислокаций приводят границы в неравновесное состояние и активизируют тем самым процессы зернограничного проскальзывания и поворота зерен. При МД-моделировании ударных волн в нанокристаллической меди [5,6] были обнаружены два важных обстоятельства: наличие зернограничного разупрочнения (обратного соотношения Холла–Петча) при величине зерен меньше $10-20 \, {\rm nm}$ и зависимость ширины ударного пластического фронта от размера нанозерен.

Целью настоящей работы является теоретический (на основе уравнений дислокационной кинетики) анализ дислокационной структуры ударных пластических волн в нанокристаллическом материале. Недавно в [12] рассматривалось влияние размера зерен $d > 1 \, \mu m$ в поликристаллическом материале на характер образующейся в нем при ударе дислокационной структуры. Проведенный в настоящей работе анализ, как и в [12], базируется на кинетическом уравнении для плотности дислокаций, включающем в себя процессы размножения, аннигиляции и диффузии дислокаций, но с учетом кинетической особенности нанокристаллического материала (размер зерен $d < 100 \,\mathrm{nm}$), а именно сильного поглощения дислокаций границами нанозерен. Сейчас отсутствуют систематические экспериментальные данные по влиянию размера нанозерен на параметры ударных пластических волн (например, на их ширину и плотность дислокаций), поэтому в работе при сравнении теории и эксперимента использованы результаты МД-моделирования ударных волн в нанокристаллической меди [5,6].

2. Основные уравнения и соотношения

С учетом структурных особенностей нанокристаллического материала и ударного на него воздействия уравнение для плотности дислокаций имеет вид

$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = \frac{u}{\lambda_m}\rho + \delta_f u \rho^{3/2} - \frac{\rho}{t_g} - h_a u \rho^2 + \lambda_D u \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где $\rho(x, t)$ — зависящая от времени t и координаты xв направлении распространения волны плотность дислокаций, u — скорость дислокаций, λ_D — характерное расстояние диффузии дислокаций в наноматериале, λ_m и $1/\delta_f \rho^{1/2}$ — длина пробега дислокаций между актами их размножения на препятствиях недеформационного $(\lambda_m^{-1} = \beta/d + \delta_f \rho_G^{1/2})$ и деформационного (лес дислокаций с плотностью ρ) происхождения соответственно, $\beta \approx 1$ и $\delta_f \approx 10^{-2}$ — коэффициенты, ρ_G — плотность геометрически необходимых (ГН) дислокаций на фронте ударной волны (см. далее формулу(5)), t_g — время аннигиляции дислокаций в границах нанозерен, h_a характерное расстояние аннигиляции винтовых участков дислокационных петель в объеме нанозерен механизмом поперечного скольжения.

В безразмерных переменных $\psi = \rho/\rho_f$ и координатах $X = x/\Lambda_0$, $T = t/t_0$ уравнение (1) принимает вид

$$\frac{\partial \psi(X,T)}{\partial T} = a\psi + \psi^{3/2} - \psi^2 + \frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2},$$
 (2a)

где $\rho_f = (\delta_f / bk_a)^2$, $\Lambda_0 = \delta_f^{-1} (\lambda_D bk_a)^{1/2}, \quad \lambda_D = (1/d + 1/\rho_G^{1/2})^{-1},$ $t_0 = \delta_f^{-2} (bk_a/u), \quad a = \delta_f^{-2} \left(\delta_f b \rho_G^{1/2} + \beta \frac{b}{d} - \frac{b}{ut_g} \right) k_a,$ (2b)

 $k_a = h_a/b$ — коэффициент аннигиляции дислокаций. Уравнение (2а), согласно [13], имеет решение в виде бегущей волны

$$\psi(X, T) = \frac{1}{[f + C \exp(qX - hT)]^2},$$
 (3a)

где C = f — постоянная интегрирования,

$$f(a) = \frac{1}{2a} \left[(1+4a)^{1/2} - 1 \right],$$

$$q(a) = \left[\frac{a}{6} \left(\frac{2}{(1+4a)^{1/2} - 1} + 1 \right) \right]^{1/2},$$

$$h(a) = \frac{2a}{3} \left(\frac{1}{(1+4a)^{1/2} - 1} + \frac{5}{4} \right).$$
(3b)

В размерных единицах уравнение (За) принимает вид

$$\rho(x,t) = \frac{\rho_m}{\left[1 + \exp\left(\frac{x - Ut}{w}\right)\right]^2},$$
(4a)

где U — скорость волны плотности дислокаций, w — ширина ее фронта, $t_w = w/U$ — время образования

волны, ρ_m — максимальная плотность дислокаций в волне,

$$U = [h(a)/q(a)](\lambda_D/bk_a)^{1/2}\delta_f u,$$

$$w = \delta_f^{-1}(\lambda_D bk_a)^{1/2}/q(a),$$

$$t_w = t_0/h(a), \quad \rho_m = \rho_f/f(a)^2.$$
 (4b)

Поскольку параметры λ_D и *a*, согласно обозначениям (2b), зависят от размера нанозерен *d* и плотности ГН-дислокаций $\rho_G = \rho_G(P)$ [4,14] и, следовательно, от давления *P*, параметры волны (4b) также зависят от размера нанозерен и давления в волне.

Влияние размера нанозерен и давления на плотность дислокаций

Высокая плотность дислокаций $10^{16}-10^{17}$ m⁻², фиксируемая в реальных и виртуальных экспериментах [6–9] в нанокристаллическом материале в процессе и после ударного на него воздействия, указывает на то, что в наноматериале имеются дополнительные механизмы генерации и размножения дислокаций, отсутствующие при квазистатическом деформировании поликристаллов с размером зерен больше одного микрометра. Такими обстоятельствами, способствующими накоплению дислокаций в нанокристаллическом материале, являются чрезвычайно короткая (порядка размера нанозерен *d*) длина свободного пробега дислокаций после их эмиссии из границ зерен и размножение дислокаций на лесе ГНдислокаций с плотностью ρ_G , генерируемых на фронте ударной волны (ее упругом предвестнике) [4,14],

$$\frac{\rho_G}{\rho_{G0}} = \frac{1}{3^3} \left(\frac{P}{P_0}\right)^3 = \frac{1}{(3\chi)^3} \left(\frac{\sigma}{E}\right)^3,$$

$$\rho_{G0} = \frac{\pi^2}{0.8\sqrt{2}(1-\nu)b^2}.$$
(5)

Здесь $P_0 \approx E$, E — модуль Юнга, $\sigma = \sigma_z$ — измеряемое в эксперименте давление (напряжение) при выходе ударной волны на тыльную поверхность образца, связанное с объемным давлением в волне соотношением $\sigma_z = \chi P$, где $\chi = 3(1 - \nu)/(1 + \nu)$, ν — коэффициент Пуассона. Оба указанных выше обстоятельства учитываются в первых членах в правых частях уравнений (1) и (2а).

Границы зерен являются не только источниками и барьерами для решеточных дислокаций, но и стоками для них. Это обстоятельство отражает третий член в правой части уравнения (1), а в уравнении (2а) — параметр a (см. обозначения (2b)). Границы зерен не могут быть безлимитным стоком для дислокаций, поскольку в результате их деформационного (дислокационного) упрочнения они оказываются заблокированными для входа в них новых дислокаций. Чтобы этого не произошло, дислокации, поглощаемые границами, должны или растворяться в них или аннигилировать,

если они разного знака, либо, перемещаясь вдоль границы, аннигилировать в стыках границ зерен [2,15]. При высоких скоростях ударного нагружения и пиконаносекундном диапазоне времен МД-моделирования диффузионно-вакансионные процессы в границах зерен с участием дислокаций сильно ограничены, если вообще возможны. Перемещение дислокаций в границах может осуществляться в этом случае атермическим механизмом перемещивания, тасования (shuffling [16]) зернограничных атомов.

Указанный механизм обеспечивает характерные времена диффузионного перемещения дислокаций в границах нанозерен порядка $t_g = d^2/4D_{ath}$, где $D_{ath} = (\delta_g)^2 \omega_D$ — атермический коэффициент зернограничной диффузии, $\delta_g \approx 2b$ — ширина границы, ω_D — дебаевская частота. При b = 0.25 nm, $\omega_D = 10^{13} \text{ s}^{-1}$ и d = 10-100 nm получаем оценки $D_{ath} = 0.25 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ и $t_g = 10^{-11} - 10^{-9} \text{ s}^{-1}$ (т. е. характерный для ударной деформации и МД-моделирования диапазон времен). Другое обстоятельство, которое требует пояснения, — это фигурирующая в формулах для скорости волны (4b) и параметра a (2b) скорость дислокаций u, контролируемая коэффициентом вязкого торможения дислокаций B,

$$u = \frac{b}{B}\tau, \ \tau = \eta \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\sigma, \tag{6}$$

где τ — девиаторная (сдвиговая) компонента давления (напряжения) σ . Время t_g и скорость дислокаций u определяют интенсивность поглощения дислокаций границами нанозерен. Необходимо заметить, что вследствие релаксации напряжений на ударном фронте (упругом предвестнике) из-за генерации на нем ГН-дислокаций девиаторная компонента напряжений за ударным фронтом снижается по величине на один-два порядка [6,17]. Далее при расчетах это обстоятельство будет учитывать коэффициент $\eta = 10^{-2}$ в (6).

На рис. 1 приведены результаты расчета согласно соотношениям (4) зависимостей плотности дислокаций в нанокристаллической меди (b = 0.256 nm, E = 128 GPa, v = 0.34, $k_a = 2$, $B = 10^{-4}$ Pa · s) от координаты x при давлении $\sigma = 10$ GPa, времени t = 2.5 ns и варьировании величины нанозерен d (указана около кривых). Видно, что в соответствии с экспериментальными данными [6–8] и результатами МД-моделирования [6–9] плотность дислокаций в нанокристаллической меди составляет $\sim 10^{17}$ m⁻², т. е. она на два порядка выше плотности дислокаций в микрокристаллических образцах меди [12]. Видно также, что зависимость плотности дислокаций от размера нанозерен имеет неоднозначный характер.

Указанное обстоятельство демонстрирует рис. 2, на котором приведены результаты расчета согласно (4b) зависимости стационарной плотности дислокаций в волне ρ_m от размера нанозерен при трех давлениях. До размера зерен $d \approx 10$ nm плотность дислокаций возрастает при уменьшении величины зерна, но при дальнейшем уменьшении их размера плотность резко



Рис. 1. Зависимость плотности дислокаций в ударной волне в нанокристаллическом материале (медь) с различным размером зерен (указан около кривых) при давлении 10 GP от координаты x в направлении распространения волны. Расчет согласно уравнениям (4).



Рис. 2. Зависимость плотности дислокаций в ударной волне от размера нанозерен при трех значениях давления в волне (указаны около кривых).

снижается из-за доминирования при d < 10 nm процесса аннигиляции дислокаций в границах зерен над процессом размножения дислокаций. Из соотношений (2b), (3b) и (4b) следует при $a \gg 1$, $f \approx a^{-1/2}$, что

$$\rho_m \approx \frac{1}{b^2 k_a} \left[\delta_f b \rho_G^{1/2} + \beta \, \frac{b}{d} - \left(\frac{d_g}{d}\right)^2 \right], \tag{7a}$$



Рис. 3. Зависимость напряжения течения в ударной волне от размера нанозерен при значениях давления 5 (1) и 8 GPa (2). Экспериментальные точки — результаты МД-моделирования ударных волн в нанокристаллической меди [5,6].

где, согласно (6),

$$d_g = \left(\frac{bD_{\text{ath}}}{u}\right)^{1/2}, \quad u(\sigma) = \eta \, \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \, \frac{b\sigma}{B}. \tag{7b}$$

Из рис. 2 видно, что плотность дислокаций увеличивается с ростом давления и достигает максимального значения $\rho_m^{\rm max}$

$$\rho_m^{\max} = \frac{1}{b^2 k_a} \left[\delta_f b \rho_G^{1/2} + \frac{\beta^2 b^2}{4 d_g^2} \right]$$
(7c)

при размере зерен $d_m = 2d_g^2/\beta b$. Поскольку, согласно (7b), $d_g^2 \sim 1/\sigma$, с ростом давления плотность дислокаций и размер зерен, соответствующие экстремуму кривых на рис. 2, изменяются с давлением σ как $\rho_m^{\max} \sim \sigma$, $d_m \sim \sigma^{-1}$, т.е. плотность дислокаций возрастает с давлением, а размер зерен d_m уменьшается.

На рис. З приведены результаты расчета зависимостей напряжений течения в ударной волне от размера нанозерен в предположении, что эти напряжения подчиняются соотношению Тейлора $\sigma_m = m_T \alpha \mu b \rho_m^{1/2}$, где $m_T = 3.05$ — фактор Тейлора, $\alpha = 0.26$ — коэффициент взаимодействия дислокаций, $\mu = 48$ GPa — модуль сдвига. Кривые 1 и 2 на рис. З соответствуют давлениям в волне 5 и 8 GPa. Для сравнения приведены также данные МД-моделирования ударных волн в нанокристаллической меди [5,6] (точки). Видно, что имеется качественное согласие между результатами настоящей работы и моделирования. В обоих случаях приведенные зависимости содержат участки зернограничного упрочнения Холла–Петча (при d > 10 nm) и зернограничного разупрочнения (обратного соотношения Холла–Петча при d < 10 nm).

Влияние размера нанозерен и давления на ширину дислокационного фронта

Рис. 4 демонстрирует результаты расчета ширины фронта волны плотности дислокаций w в нанокристаллической меди согласно соотношениям (2b), (3b) и (4b) в зависимости от размера нанозерен d. Сплошные линии иллюстрируют зависимости w(d) с учетом поглощения дислокаций границами зерен, а пунктир — в отсутствие поглощения и аннигиляции дислокаций в границах. Числа около кривых — величина давления σ . В отсутствие аннигиляции дислокаций в границах ширина дислокационного фронта по мере уменьшения размера нанозерен плавно снижается вплоть до нуля как $w \approx 6^{1/2} d$ независимо от величины давления. Другая ситуация имеет место, если дислокации аннигилируют в границах зерен. В этом случае, начиная с некоторого размера зерна d_w , зависящего от давления, ширина ударного дислокационного фронта начинает сильно возрастать, и кривые w(d) на рис. 4 приобретают неоднозначный характер.

Согласно формулам (2b), (3b), (4b) и (7b), при $a \gg 1$ и $q(a) \approx (a/6)^{1/2}$ для ширины дислокационного фронта



Рис. 4. Зависимость ширины дислокационного фронта в ударной волне w от размера нанозерен согласно соотношениям (2b), (3b) и (4b) в отсутствие (пунктир) и при наличии (сплошные кривые) поглощения дислокаций границами нанозерен при трех значениях давления (указаны около кривых).



Рис. 5. Зависимость отношения ширины *w* дислокационного фронта в ударной волне к размеру нанозерен от величины зерен в отсутствие (*a*) и при наличии (*b*) поглощения дислокаций границами зерен при трех значениях давления. Экспериментальные точки — результаты МД-моделирования ударных волн в нанокристаллической меди [5,6].

и величины зерна d_w , соответствующих минимуму на кривых w(d) на рис. 4, получаем соотношения

$$w \approx 6^{1/2} \left[\frac{b}{(\rho_G^{1/2} + 1/d)(\delta_f b \rho_G^{1/2} + \beta(b/d) - (d_g/d)^2)} \right]^{1/2},$$
(8a)
$$d_w \approx \frac{1}{2} \rho_G^{-1/2} \left[g - 1 + \sqrt{(g - 1)^2 + 6g} \right], \quad g = \frac{d_g^2}{b} \rho_G^{1/2}.$$
(8b)

На рис. 5, а приведены отношения ширины дислокационного фронта w к размеру нанозерен d в зависимости от величины зерна при трех значениях давления, полученные при МД-моделировании ударных волн в нанокристаллической меди [5,6]. Кривые на рисунке иллюстрируют результаты расчета зависимостей отношений w/dот d согласно соотношениям (2b), (3b), (4b) и (7b) при трех значениях давлений в отсутствие аннигиляции дислокаций в границах нанозерен. Обращает на себя внимание то, что при всех давлениях "экспериментальные" точки при размерах нанозерен $d < 10 \,\mathrm{nm}$ лежат выше расчетных кривых, а при размерах зерен $d > 10 \,\mathrm{nm}$ они с ними хорошо согласуются. В отсутствие аннигиляции дислокаций в границах зависимости w/d от d при d
ightarrow 0для всех давлений стремятся к предельному значению $6^{1/2} \approx 2.45$. На рис. 5, *а* пунктир показывает, что при нулевом давлении в отсутствие ГН-дислокаций величина отношения w/d не зависит от размера нанозерен.

Принимая во внимание, что в (8b) параметр $g \ll 1$, получаем оценки величины зерна $d_w \approx 3d_g^2/2b$ и ширины фронта $w_{\min} \approx 9d_g^2/\sqrt{2}b$, соответствующие минимуму на кривых w(d) на рис. 4. Поскольку $d_g^2 = bD_{ath}/u \sim \sigma^{-1}$, величина $d_w \sim w_{\min} \sim \sigma^{-1}$ (рис. 6). На рис. 5, *b* показа-



Рис. 6. Зависимость размера зерен d_w и ширины фронта w_{\min} , соответствующих минимуму на кривых w(d) на рис. 4, от давления в волне.



Рис. 7. Зависимость отношения w/d от давления в ударной волне для трех значений размеров нанозерен. Экспериментальные точки — результаты МД-моделирования ударных волн в нанокристаллической меди [5,6].

ны зависимости отношения w/d от размера зерна при трех значениях давления с учетом поглощения дислокаций границами зерен. Как видно из этого рисунка, учет поглощения дислокаций границами приводит к согласованию экспериментальных данных [5,6] и теории также и в диапазоне размеров зерен d < 10 nm. Для полноты картины на рис. 7 показаны зависимости отношения w/dот давления для размеров зерен 5, 10 и 20 nm [5,6]. Расчетные кривые для этих зерен демонстрируют хорошее согласие теории и результатов МД-моделирования ударных волн в нанокристаллической меди.

5. Выводы

1. Разработана микроскопическая дислокационнокинетическая модель формирования дислокационной структуры в нанокристаллических материалах (размер зерен d < 100 nm) при распространении в них интенсивных ударных пластических волн. Теоретической основой модели является нелинейное дифференциальное кинетическое уравнение для плотности дислокаций, включающее в себя процессы размножения, аннигиляции и диффузии дислокаций с учетом сильного поглощения дислокаций границами нанозерен.

2. Получено решение этого уравнения в виде ударной волны для плотности дислокаций и найдены зависимости стационарной плотности дислокаций и ширины дислокационного фронта от размера зерен и давления в волне. Сравнение этих зависимостей с результатами имеющихся в литературе реальных и виртуальных экспериментов по МД-моделированию ударных волн в нанокристаллической меди показало хорошее их количественное согласие.

Список литературы

- M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson. Progr. Mater. Sci. 51, 427 (2006).
- [2] Г.А. Малыгин. ФТТ 49, 961 (2007).
- [3] Р.А. Андриевский, А.М. Глезер. УФН 179, 337 (2009).
- [4] M.A. Meyers, H. Jarmakani, E.M. Bringa, B.A. Remington. In: Dislocations in solids / Eds J.P. Hirth, L.Kubin. North-Holland (2009). Vol. 15. Ch. 89, 96.
- [5] E.M. Bringa, A. Caro, M. Victoria, N. Park. J. Metals 57, 67 (2005).
- [6] E.M. Bringa, A. Caro, Y.M. Wang, J.M. McNaney, B.A. Remington, R.F. Smith, B. Torralva, H. Van Swygenhoven. Science **309**, 1838 (2005).
- [7] E.M. Bringa, K. Rosolankova, R.E. Rudd, B.A. Remington, J.S. Wark, M. Duchaineau, D.H. Kalantar, J. Hawreliak, J. Belak. Nature Mater. 5, 805 (2006).
- [8] Y.M. Wang, E.M. Bringa, J.M. McNaney, M. Victoria, A.M. Hodge, R.F. Smith, B. Torralva, B.A. Remington, C.A. Schuh, H. Jarmakani, M.A. Meyers. Appl. Phys. Lett. 88, 061 917 (2006).
- [9] N. Gunkelmann, D.R. Tramontina, B.A. Remington, H.M. Urbassek. New J. Phys. 16, 093 032 (2014).
- [10] H. Jarmakani, E.M. Bringa, P. Erhart, B.A. Remington, Y.M. Wang, N.Q. Vo, M.A. Meyers. Acta Mater. 56, 5584 (2008).
- [11] H. Van Swygenhoven, M. Spacer, A. Caro, D. Farkas. Phys. Rev. B 60, 22 (1999).
- [12] Г.А. Малыгин, С.Л. Огарков, А.В. Андрияш. ФТТ 56, 2168 (2014).
- [13] А.Д. Полянин, В.Ф. Зайцев. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики. Физматлит, М. (2002). 432 с.
- [14] Г.А. Малыгин, С.Л. Огарков, А.В. Андрияш. ФТТ 55, 715 (2013).
- [15] Г.А. Малыгин. ФТТ 37, 2281 (1995).
- [16] D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A. Mukhergee, H. Gleiter. Acta Mater. 53, 1 (2005).
- [17] Г.А. Малыгин, С.Л. Огарков, А.В. Андрияш. ФТТ 56, 1123 (2014).