

07,08

## Зарождение дислокаций в сплавах алюминия с медью

© И.А. Брюханов<sup>1,2</sup>, В.Л. Ковалев<sup>1,2</sup>, А.В. Ларин<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>2</sup> Научно-исследовательский институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: ibryukhanov@gmail.com

(Поступила в Редакцию 20 ноября 2014 г.

В окончательной редакции 20 марта 2015 г.)

Проведено исследование влияния примесей меди на процесс зарождения дислокаций в алюминии с помощью метода определения среднего времени жизни метастабильного состояния. Первичные данные получены методом молекулярной динамики. Найденные зависимости скоростей зарождения дислокаций от сдвиговых напряжений в чистом алюминии и твердых растворах алюминия с медью представлены в аррениусовском виде. Установлено, что с увеличением концентрации меди уменьшаются значения активационных параметров для этих зависимостей. Показано, что с ростом температуры увеличивается чувствительность скорости зарождения дислокаций к напряжению в твердых растворах алюминия с 0.1–3 at.% меди в отличие от чистого алюминия, в котором чувствительность от температуры практически не зависит. На основе полученных аппроксимаций скоростей зарождения дислокаций обсуждаются их зависимости от концентрации меди и температуры во всем диапазоне напряжений.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 14-01-00310 а).

### 1. Введение

Из-за того что чистый алюминий обладает низкой прочностью, в промышленности в качестве конструктивных материалов используются алюминиевые сплавы. Высокопрочные сплавы алюминия, в которых медь является главным легирующим компонентом, широко распространены в машиностроении и авиастроении. Упрочнение сплава достигается за счет торможения примесными атомами движения дислокаций — элементарных переносчиков пластической деформации. В сплаве алюминия с медью такими барьерами могут быть атомы меди, замещающие атомы алюминия в кристаллической решетке [1].

В условиях ударно-волнового нагружения пластическая деформация может осуществляться за счет зарождения дислокаций [2]. Зарождение дислокаций в сплавах может происходить либо гомогенно, т.е. в идеальной кристаллической решетке, либо гетерогенно (вблизи неоднородностей среды, таких как примесные зоны, поры, границы зерен). Теоретические вопросы, связанные с другими механизмами пластической деформации, например такими, как движение и размножение дислокаций, рассматривались в работах [3–5].

Основные экспериментальные результаты изучения зарождения дислокаций были получены методом наноиндентирования [6–8]. Если размер индентора меньше среднего расстояния между дислокациями, то при введении его в материал возникают локальные напряжения в области, в которой нет существующих дислокаций. Это приводит к тому, что в материале появляются напряжения, близкие к теоретическому пределу на сдвиг. Метод наноиндентирования позволяет определить зависимость

критических нагрузок от глубины проникновения и из нее оценить зависимость скорости зарождения дислокаций от напряжений. Полученная зависимость скорости зарождения обычно аппроксимируется в аррениусовском виде.

Теоретическая модель гомогенного зарождения дислокаций предложена в работе [3]. Образование зародыша дислокационной петли рассматривается как локальный сдвиг части атомов на величину вектора Бюргерса. Энергия зародыша петли определяется на основе теории упругости, а оценка скорости зарождения для зародышей критического размера проводится на основе больцмановского распределения [3]. В работах [9–11] предложен другой механизм зарождения петли путем наноскопического идеального сдвига, величина которого постепенно увеличивается в процессе зарождения, а размер самого зародыша остается примерно постоянным. Авторы этих работ считают, что такой механизм реализуется преимущественно в нанокерамиках или сплавах [12–14].

В работах [15–17] предложены теоретические модели релаксации напряжений путем гетерогенного зарождения прямолинейных частичных дислокаций несоответствия в плоских тонкопленочных гетероэпитаксиальных системах [15] и петель дислокаций несоответствия в композитных наночастицах типа ядро–оболочка [16,17]. В частности, были рассчитаны критические условия зарождения прямоугольных [16] и круговых [17] призматических дислокационных петель. Показано, что основным фактором, определяющим энергетическую предпочтительность зарождения дислокационной петли в подобных структурах, является величина несоответствия.

Для определения скорости зарождения дислокаций обычно применяются метод расчета переходного состо-

яния (например, в форме наиболее распространенного алгоритма nudged elastic band — NEB [18]) [19,20] и метод прямого молекулярно-динамического (МД) моделирования [21]. Недостатком метода NEB является то, что он позволяет находить активационные параметры процесса зарождения дислокаций только при нулевой температуре, что может приводить к недооценке значений скорости зарождения дислокаций на несколько порядков [22].

МД-моделирование процесса гомогенного зарождения дислокаций в алюминии проведено в работе [21]. Найденные значения активационной энергии и объема для скорости гомогенного зарождения дислокаций значительно превышали величины, полученные при наноиндентировании. Поэтому в [21] был сделан вывод, что при наноиндентировании происходит гетерогенное зарождение дислокаций. В работе [23] с помощью NEB-расчетов было установлено, что энергия активации зарождения дислокаций уменьшается вследствие влияния примесных атомов германия, расположенных в угловых дефектах поверхности кремния. В работах [24,25] методом МД было показано, что примесные атомы в твердом растворе уменьшают критическое напряжение зарождения дислокаций при одноосном сжатии с постоянной скоростью. Полученные в этих работах значения критического напряжения, однако, зависят от времени ожидания зарождения дислокаций и поэтому являются оценочными величинами.

Настоящая работа посвящена изучению процессов зарождения дислокаций в сплавах алюминия с медью. Целью работы является исследование влияния примесных атомов меди на механизм и скорость зарождения дислокаций в алюминии.

## 2. Моделирование зарождения дислокаций

2.1. Модели примесей меди в алюминии. Для исследования процесса зарождения дислокаций в твердом растворе алюминия с медью использовалась МД-модель бездефектного алюминия [21], в которой часть атомов алюминия заменялась случайным образом на атомы меди. При этом форма расчетной ячейки выбиралась близкой к кубической. По всем трем направлениям задавались периодические граничные условия для исключения влияния свободной поверхности на процесс зарождения. Как показано в [21], влияние размера системы на процесс гомогенного зарождения несущественно, поэтому рассматривалась только система, состоящая из  $N = 311\,040$  атомов. Размер этой системы приблизительно был равен  $17 \times 17 \times 17$  nm. Рассматривались системы, в которых содержание атомов Си в сплаве составляло 0,1, 0,5, 1, 3 и 5 at.%. Это позволило изучить влияние концентрации атомов меди в алюминии на скорость зарождения дислокаций.

Использовался потенциал взаимодействия атомов Al и Cu из работы [26], который является обобщением

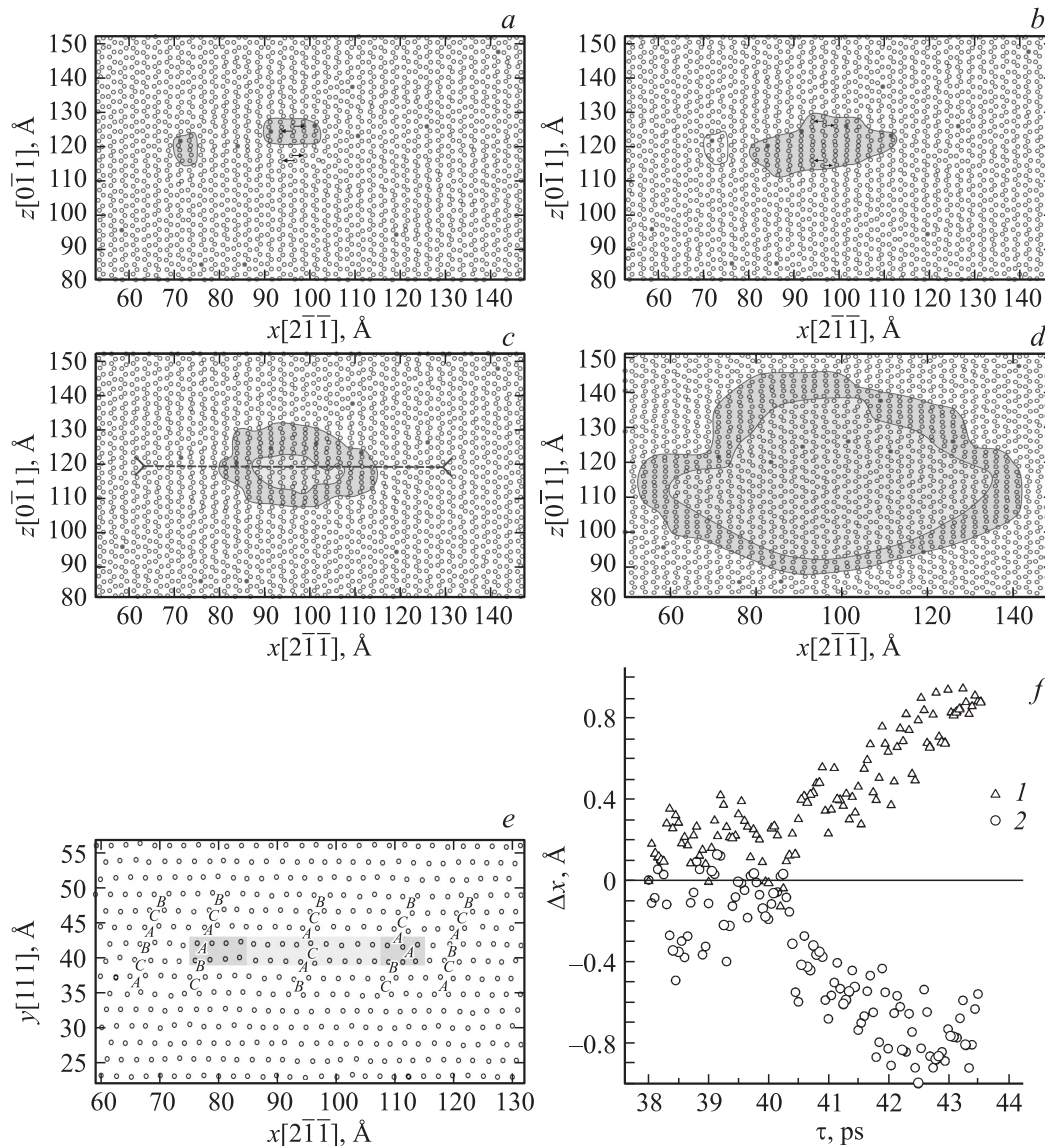
традиционного потенциала погруженного атома (EAM) с учетом угловых взаимодействий (angular dependent potential). Данный потенциал был параметризован на основе экспериментальных данных по параметру решетки фазы  $\theta'$  (матрица алюминия с метастабильной фазой  $\text{Al}_2\text{Cu}$ ), энергиям образования вакансий в фазах  $\theta'$  и  $\theta$  и их упругим модулям.

Минимизация энергий систем твердого раствора алюминия с медью при нулевом давлении в ячейке производилась методом градиентного спуска [27].

Все МД-расчеты были проведены в пакете программ LAMMPS [28].

2.2. Механизмы зарождения дислокаций и скорость их распространения. Для моделирования напряженного состояния система подвергалась однократному сдвигу вдоль направления вектора частичной дислокации в ГЦК-решетке алюминия  $b = -a/6[2\bar{1}\bar{1}]$ , где  $a$  — период решетки. Величина сдвига определяет касательное или сдвиговое напряжение  $\sigma_{xy}$ , возникающее в системе, которое рассчитывалось по теореме вириала во всей расчетной ячейке [29]. Начальная температура системы задавалась с помощью соответствующего максвелловского распределения скоростей атомов. При заданной температуре (поддерживалась термостатом Ланжевена [30]) и фиксированной деформации проводились МД-расчеты уравнений движения атомов системы. Шаг интегрирования уравнений движения атомов задавался равным 1 fs. Исследовалось поведение систем при температурах 300, 400, 500, 600 и 700 K.

Вблизи примесных атомов меди наблюдалось локальное искажение идеальной кристаллической решетки алюминия: атомы алюминия смещались по направлению к атомам меди. В результате сдвиговой деформации и тепловых флуктуаций наиболее часто вблизи этих локальных неоднородностей образовывались дислокационные зародыши, представляющие собой область атомов, находящихся в переходном ГЦК–ГПУ-положении. В работе [31] эти области неоднородности получили название протодефектов; ранее они были экспериментально обнаружены в работах [11,13] как нановозмущения кристаллической решетки. В этих работах также было показано, что в процессе пластической деформации протодефект может трансформироваться обратно в ГЦК-структуру. На рис. 1, *a–d* изображены атомы двух ближайших плоскостей скольжения (111) в алюминии с 0,5 at.% меди, в которых произошло зарождение и развитие дислокационной петли. Как видно из рис. 1, *a*, в момент времени 40,3 ps вблизи двух атомов меди образовалось два структурных перехода ГЦК–ГПУ-типа, один из которых в следующий момент времени исчез (рис. 1, *b*), а другой продолжил расти. Это наблюдение подтверждается ранее полученными результатами [11,13,31]. В некоторых случаях, когда приложенное сдвиговое напряжение было недостаточно большим, развитие зародыша замедлялось присутствием атомов меди. Из рис. 1 видно, что размер зародыша

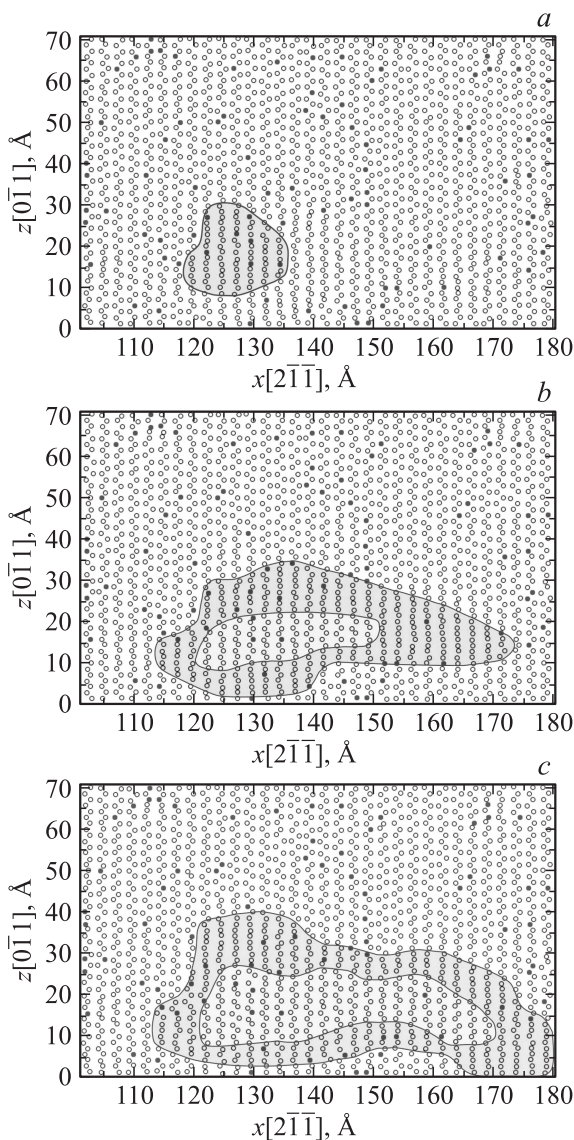


**Рис. 1.** Зарождение и развитие дислокационной петли в сечениях  $xz$  ( $a-d$ ) и  $xy$  ( $e$ ) твердого раствора Al с 0.5 at.% Cu при  $T = 300\text{ K}$  в моменты времени 40.3 ( $a$ ), 40.7 ( $b$ ), 41.7 ( $c, e$ ), 42.6 ps ( $d$ ). Светлые кружки — атомы алюминия двух ближайших плоскостей скольжения (111), в которых произошло зарождение, темные кружки — атомы меди Cu. Место сечения дислокационной петли ( $e$ ) в плоскости  $xy$  показано на части  $c$ , буквами обозначены атомные плоскости. Стрелки показывают направление смещения атомов алюминия, изменение величины которого со временем представлено на части  $f$  (1 — для сдвига направо, 2 — для сдвига влево). Темно-серым цветом обозначены атомы дислокационного зародыша и ядра петли, светло-серым — атомы дефекта упаковки вычитания.

в момент времени 40.7 ps (рис. 1,  $b$ ) ограничивается четырьмя атомами меди, и из-за того, что эти атомы препятствуют дальнейшему увеличению зародыша, формирование дислокационной петли происходит не сразу, а только через 1 ps (рис. 1,  $c$ ). При этом внутри дислокационной петли формируется дефект упаковки вычитания. Порядок атомных плоскостей в сечении дислокационной петли показан на рис. 1,  $e$ .

Механизм, по которому происходит образование и дальнейшее развитие зародыша, заключается в том, что часть атомов двух ближайших плоскостей скольжения (111) сдвигается навстречу друг другу по направлению

вектора Бюргера частичной дислокации  $[2\bar{1}\bar{1}]$ . Величина сдвига атомов постепенно увеличивается со временем (рис. 1,  $f$ ), но испытывает случайные изменения из-за тепловых флуктуаций. При этом сумма сдвигов атомов сначала (в момент времени 40 ps) достигает значения, равного половине вектора Бюргера частичной дислокации (0.82 Å). Конфигурация системы со сдвинутыми таким образом атомами энергетически менее стабильна, чем с атомами в равновесной кристаллической решетке и даже в дефекте упаковки, из-за невыгодности расположения атомных плоскостей (BCAABC) в ней. Поэтому либо такой дефект исчезает (левый дефект на рис. 1,  $b$ ),



**Рис. 2.** Зарождение и развитие дислокационной петли в твердом растворе Al с 5 at.% Cu при  $T = 300$  К в моменты времени 40 (a), 45 (b), 71 ps (c). Показана плоскость, в которой происходит зарождение дислокации.

либо атомы внутри дефекта продолжают сдвигаться, пока величина сдвига не достигнет величины вектора Бюргера ( $1.65 \text{ \AA}$  при 44 ps), соответствующей дефекту упаковки. При этом формируется ядро дислокации, атомы которого находятся в переходном ГЦК–ГПУ-положении (темно-серая область на рис. 1, c, d). Этот результат косвенно подтверждает модель зарождения дислокаций, предложенную в работе [10]. Эта модель также подтверждается NEB-расчетами энергии активации зарождения дислокационной петли в чистой меди в работе [32].

Из рис. 1, d видно, что с дальнейшим распространением дислокационной петли выделяется структура дислокационной линии, которая ограничивает дефект упаковки. В процессе движения дислокация сталкивается с примесными атомами меди, из-за чего искажается

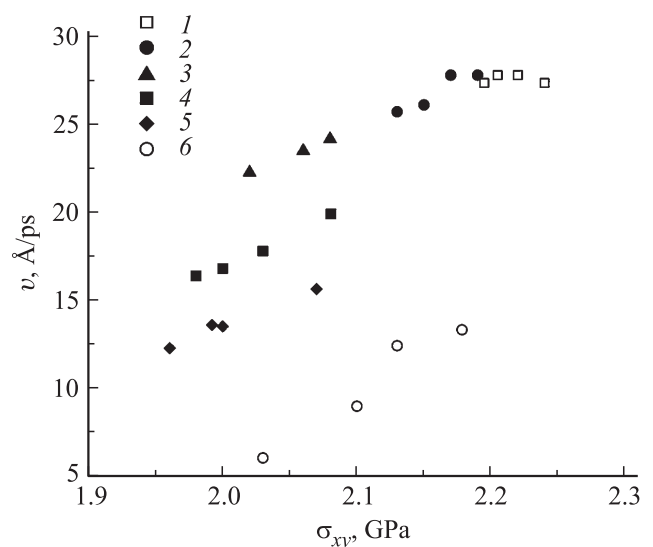
ее форма. При этом ширина дислокационного ядра в направлении сдвига немного больше, чем в перпендикулярном направлении, и составляет от 3 до  $7 \text{ \AA}$ . В случае твердых растворов алюминия с 3 и 5 at.% меди время с момента зарождения до начала движения дислокационной петли иногда было значительно больше чем 1–2 ps и достигало 30 ps. Такой случай показан на рис. 2 на примере твердого раствора алюминия с 5 at.% меди. Видно, что в момент 40 ps (рис. 2, a) возникает дислокационный зародыш, из которого к моменту времени 45 ps (рис. 2, b) формируется дислокационная петля. Однако за следующие 25 ps ее размер практически не меняется, и только с момента времени 71 ps (рис. 2, c) она начинает „разгоняться“ и заполняет всю плоскость скольжения к моменту 87 ps.

Для оценки скорости расширения дислокационной петли определялся момент времени ее возникновения  $\tau_{\text{nuc1}}$  и момент времени  $\tau_{\text{full}}$ , в который петля заполняла всю плоскость скольжения. В твердом растворе алюминия с 3 и 5 at.% меди определялась скорость „расширяющейся“ дислокационной петли. В этих случаях момент времени  $\tau_{\text{nuc1}}$  совпадал с началом разгона, при котором визуально определялся диаметр  $d$  дислокационной петли. В остальных системах диаметр  $d$  полагался равным нулю. Вследствие того что дислокационная петля распространяется во все стороны одновременно, скорость ее расширения определялась по формуле

$$v = \frac{L - d}{2(\tau_{\text{full}} - \tau_{\text{nuc1}})}, \quad (1)$$

где  $L$  — сторона кубической ячейки.

Скорость расширения дислокационной петли зависит как от температуры, так и от приложенных сдвиговых



**Рис. 3.** Зависимости скорости распространения дислокационной петли от сдвигового напряжения при  $T = 300$  К для чистого Al (1) и твердых растворов Al с 0.1 (2), 0.5 (3), 1 (4), 3 (5) и 5 at.% Cu (6).



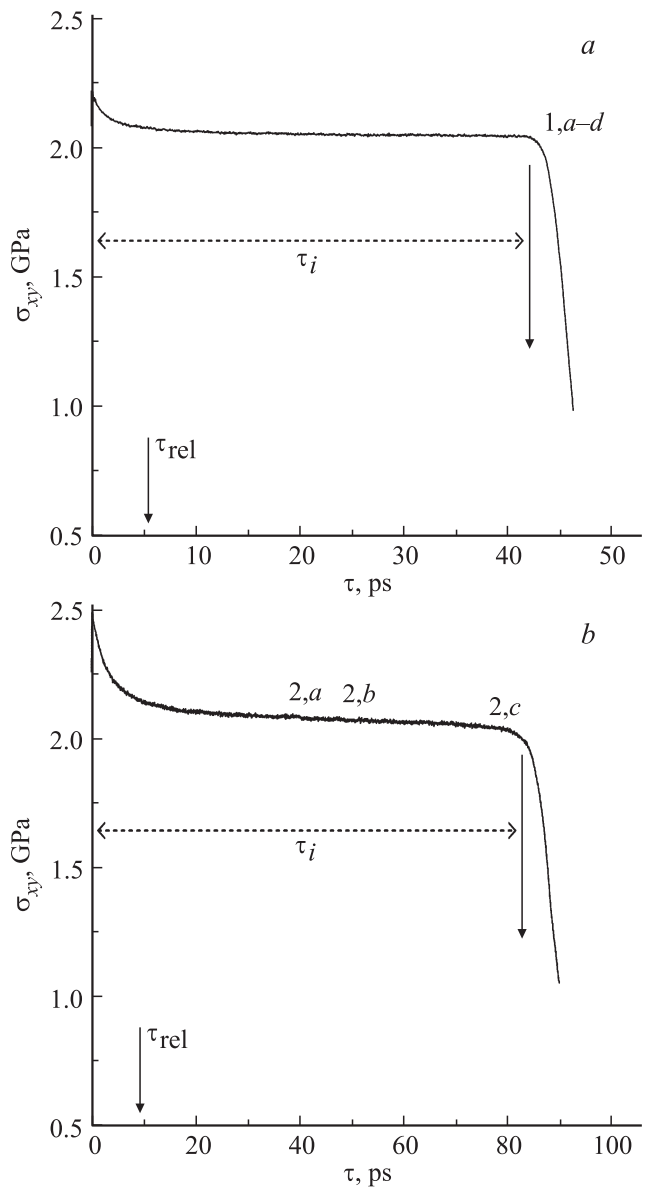
напряжений. Значения сдвигового напряжения в расчетной ячейке при определении скорости движения дислокационной петли вычислялись в момент времени  $\tau_{\text{nucl}}$ .

На рис. 3 показаны рассчитанные зависимости скорости дислокационной петли от среднего сдвигового напряжения в расчетной ячейке для различных систем. Полученные значения скоростей расширения петли в чистом алюминии близки к  $28 \text{ \AA/ps}$  — „релятивистскому“ пределу по отношению к скорости звука движения дислокаций, что согласуется с результатом работы [21]. Из этого рисунка также видно, что атомы меди существенно тормозят движение дислокационной петли. Так, величина скорости расширения петли сильно уменьшается при концентрации меди 5 at.%. Отметим, что с увеличением концентрации меди в алюминии увеличивается значение сдвигового напряжения, необходимого для развития дислокационной петли заданной скорости.

2.3. Метод определения скорости зарождения дислокаций. Применялся метод определения скорости зарождения из работы [21]. Скорость (или частота) зарождения дислокаций  $J$  определяет среднее количество зародышей, образующихся в системе за единицу времени на один атом. Способ нахождения величины  $J$  основан на определении среднего времени жизни метастабильного состояния (в данном случае деформированного) с помощью МД-расчетов. Для определения среднего времени жизни проводилась серия МД-расчетов для систем, соответствующих одному термодинамическому состоянию, но имеющих разные микросостояния. Такой набор систем был получен путем задания различных распределений Максвелла по скоростям атомов в начальный момент времени для одной и той же температуры.

На рис. 4 показаны рассчитанные в настоящей работе типичные кривые релаксации сдвигового напряжения в твердых растворах алюминия с медью. Из рис. 4 следует, что время релаксации  $\tau_{\text{rel}}$ , за которое твердые растворы релаксируют к состоянию равновесия, увеличивается с ростом концентрации меди от 3 ps в чистом алюминии до 12 ps в растворе с концентрацией меди 5 at.%. Релаксация напряжений в твердых растворах с 0.1–1 at.% меди аналогична полученной ранее при гомогенном зарождении дислокации в алюминии [21]. После достижения метастабильного состояния равновесия через некоторое время сдвиговое напряжение  $\sigma_{xy}$  резко снижается вследствие зарождения дислокационной петли. На этом участке релаксации напряжения дислокационная петля расширяется и распространяется до размеров всей ячейки. Величина сдвигового напряжения в системе определялась как среднеарифметическое значение сдвиговых напряжений на равновесном участке ( $\sigma_{xy} = 2.060 \text{ GPa}$  на рис. 1 и 4, *a*).

В алюминии с содержанием 3 и 5 at.% меди релаксация напряжений проходит несколько иначе. На рис. 4, *b* на примере алюминия с концентрацией 5 at.% меди показано, что по достижении состояния равновесия в системе наблюдается медленная релаксация сдвигового напряжения из-за образования дислокационной



**Рис. 4.** Релаксация сдвигового напряжения и время жизни метастабильного состояния при  $T = 300 \text{ K}$ : *a* — Al с 0.5 at.% Cu, *b* — Al с 5 at.% Cu.  $\tau_{\text{rel}}$  — время релаксации систем к равновесию (показано вертикальными стрелками слева). Пунктирными линиями показан интервал времени, за который определялось время жизни  $\tau_i$  метастабильного состояния. Визуализация моделей представлена на рис. 1 и 2. Около кривых релаксации напряжений указаны номера рисунков, соответствующих визуализации.

петли (рис. 2, *a–c*). Только когда размер дислокационной петли становится достаточно большим, значение сдвигового напряжения  $\sigma_{xy}$  во всей ячейке резко уменьшается. В этом случае соответствующие значения сдвигового напряжения определялись визуально в момент времени возникновения дислокационной петли  $\tau_p$  ( $\sigma_{xy} = 2.072 \text{ GPa}$  на рис. 2 и 4, *b*).

Вообще говоря, время жизни метастабильного состояния  $\tau_i$  логично рассчитывать как время до образования

дислокационной петли. В случаях с чистым алюминием и твердыми растворами с 0.1–1 at.% меди время  $\tau_i$  совпадает со временем до начала резкого уменьшения сдвигового напряжения  $\sigma_{xy}$  (рис. 4, а). Однако в твердых растворах алюминия с 3–5 at.% меди это не так: дислокация зарождается на равновесном участке (рис. 4, б, момент времени, соответствующий рис. 2, а), поэтому определение времени до зарождения дислокации в этих случаях возможно лишь при визуализации каждого МД-расчета, что связано с вычислительными трудностями. Кроме того, время до разгона дислокационной петли отличалось в каждом МД-расчете. По этой причине в таких случаях время жизни  $\tau_i$  определялось аналогичным образом: как время до начала резкого снижения сдвигового напряжения  $\sigma_{xy}$ . Для каждого термодинамического состояния рассчитывалось не менее сорока независимых времен жизни его микросостояний. По полученному набору величин  $\tau_i$  строилась функция распределения.

На рис. 5 приведена характерная для твердых растворов зависимость от времени  $\tau$  количества микросостояний  $n$  (в логарифмическом масштабе), в которых зарождение дислокаций не произошло к этому моменту времени. Эта зависимость, построенная по набору рассчитанных независимых времен жизни метастабильного состояния, соответствует распределению времени зарождения дислокаций. Из рис. 5 видно, что полученные распределения  $n$  при зарождении дислокаций в твердых растворах алюминия с медью хорошо описываются пуассоновским распределением (прямая на рис. 5)

$$n = n_0 \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_d}\right), \quad (2)$$

где  $n_0$  и  $\tau_d$  — параметры аппроксимации. Для гомогенного зарождения дислокаций аналогичный результат получен в [21].

Аппроксимация результатов на рис. 5 по формуле (2) проводилась в той области, в которую попало наибольшее число траекторий (обычно  $n > 15$ ), что позволило уменьшить погрешность расчета.

Скорость зарождения дислокаций можно рассчитать следующим образом:

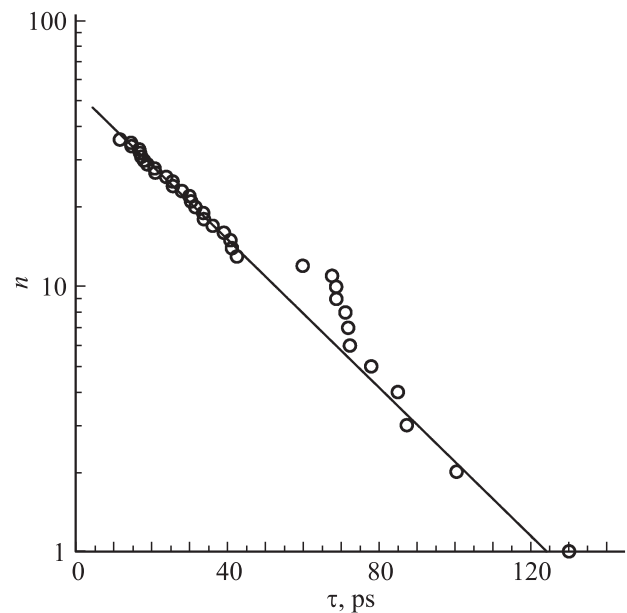
$$J = \frac{1}{N\tau_d}, \quad (3)$$

где  $N$  — число атомов в системе, а  $\tau_d$  — среднее время ожидания зародыша, которое определялось из аппроксимации (2) (рис. 5).

Рассчитанные зависимости скорости зарождения дислокаций от сдвигового напряжения и температуры аппроксимировались по формуле, которая обычно используется при анализе экспериментов по наноиdentификации:

$$J = J_0 \exp\left(-\frac{U - \sigma_{xy}V}{k_B T}\right), \quad (4)$$

где  $J_0$  — частотный множитель, соответствующий вероятности того, что атом, находящийся на краю критических зародышей, при перескоках присоединится к



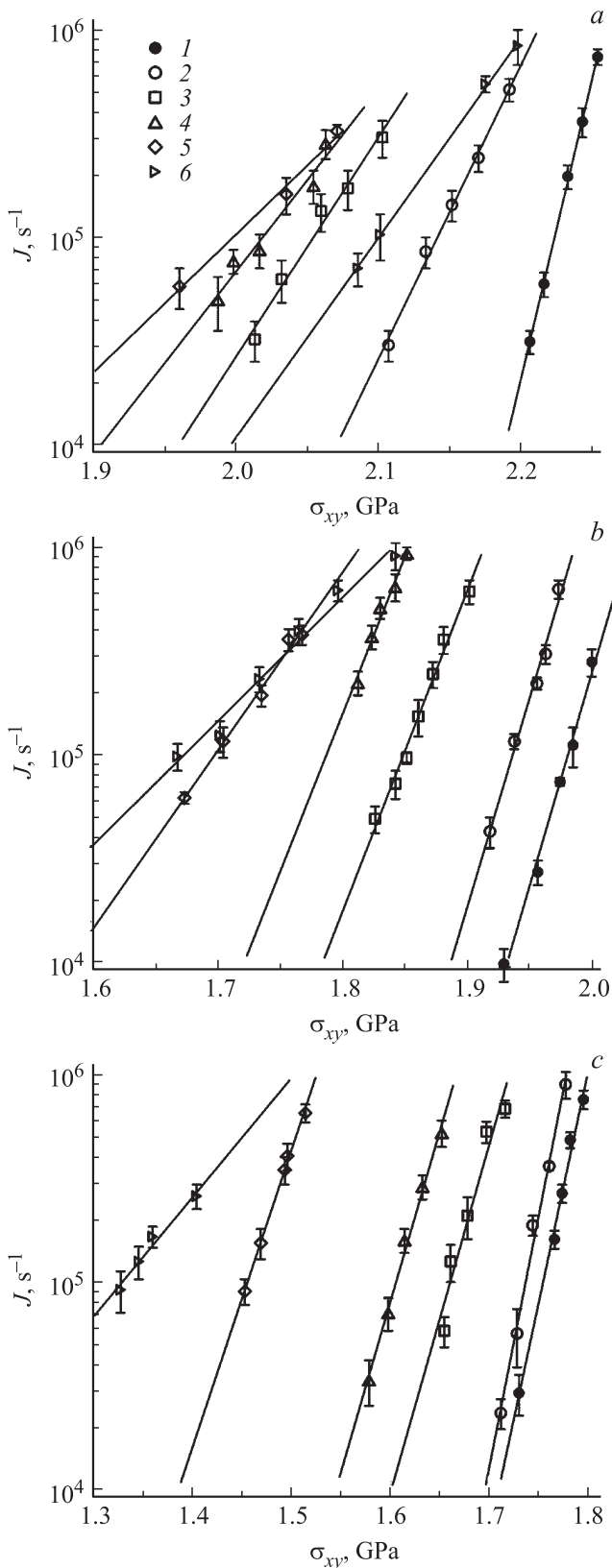
**Рис. 5.** Количество  $n$  микросостояний (в логарифмическом масштабе), в которых зарождение дислокаций к моменту времени  $\tau$  в системе Al с 0.5 at.% Cu не произошло.  $T = 300$  К.

зародышу,  $U$  — энергия активации,  $V$  — активационный объем,  $\sigma_{xy}$  — сдвиговое напряжение в расчетной ячейке. Частотный множитель оценивался по формуле  $J_0 = 8\pi r w / b$ , где  $r$  — радиус дислокационной петли,  $w$  — дебаевская частота,  $b$  — модуль вектора Бюргера [3]. Для исследуемых материалов были выбраны значения  $r = 5 \text{ \AA}$ ,  $w = 10^{13} \text{ s}^{-1}$ ,  $b = 1.65 \text{ \AA}$ , при которых  $J_0$  равен  $10^{15} \text{ s}^{-1}$  [21].

При аппроксимации по формуле (4) определялись уравнения экспонент наибольшего и наименьшего наклона, проходящие через вертикальные отрезки значений  $J$ , соответствующие погрешностям при их вычислении (рис. 6). Уравнения этих кривых в общем случае имеют вид  $J = A \exp(B\sigma_{xy})$ . Значения  $U$  и  $V$  вычислялись по формулам  $U = -\ln(A/J_0)k_B T$  и  $V = 160Bk_B T$  ( $1 \text{ eV/\AA}^3 = 160 \text{ GPa}$ ). Значения параметров  $U$  и  $V$  для двух построенных экспонент наибольшего и наименьшего наклона определяли верхнюю и нижнюю границу погрешности, соответственно.

### 3. Результаты расчетов

3.1. Скорость зарождения дислокаций в твердых растворах алюминия с медью. Результаты расчетов скорости зарождения дислокаций в алюминии с различной концентрацией примесных атомов меди показаны на рис. 6. Из них видно, что в пределах расчетной погрешности наклоны зависимости скорости зарождения дислокаций  $J$  уменьшаются с ростом концентрации меди (кроме кривой б на рис. 6, а и кривой 3 на рис. 6, б), а сами эти зависимости смещаются влево в сторону меньших сдвиговых напря-



**Рис. 6.** Зависимость скорости зарождения дислокаций от сдвигового напряжения в чистом Al (1) и твердых растворах Al с 0.1 (2), 0.5 (3), 1 (4), 3 (5) и 5 at.% Cu (6) при температурах 300 (a), 500 (b) и 700 К (c). Сплошные линии — аппроксимации по формуле (4). Вертикальные отрезки — погрешность вычислений по методике, описанной в подразделе 2.3.

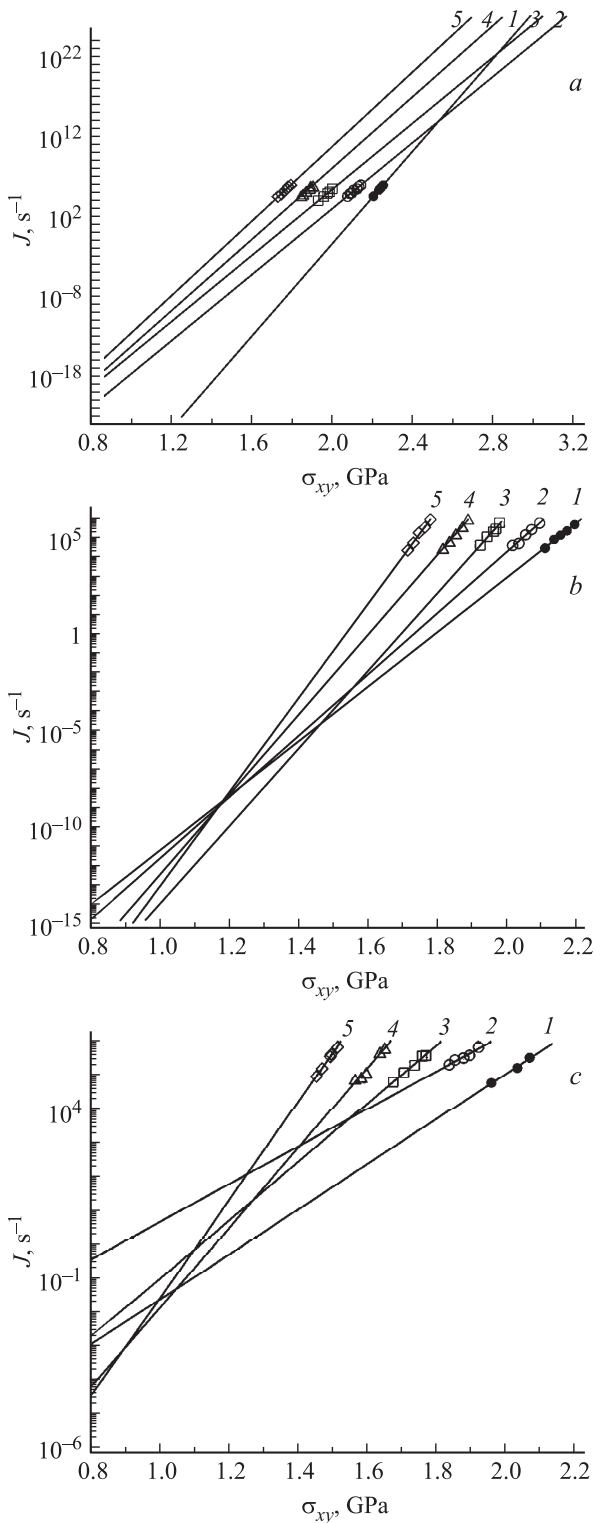
жений. (В областях напряжений, показанных на рис. 6, a и b, модель 6 для алюминия с 5 at.% меди нарушает монотонный порядок кривых, потому что пересекает их при меньших напряжениях.) Это означает, что в области напряжений, в которой были получены численные значения  $J$ , скорость зарождения  $J$  монотонно возрастает с ростом концентрации меди.

Теперь предположим, что аппроксимацию  $J$  по формуле (4) можно экстраполировать за пределы диапазона напряжений, в котором были получены численные значения  $J$ . Тогда, если продлить зависимости  $J$  в область больших напряжений, зависимости  $J$  для разных концентраций меди от 0.1 до 3 at.% должны пересечься при некоторых сдвиговых напряжениях, расчетные значения которых начинаются с 2.05, 1.8, 1.9 GPa для температур 300, 500, 700 К соответственно (для раствора с 5 at.% меди эти значения меньше). При напряжениях выше этих значений зависимость скорости  $J$  от концентрации меди становится немонотонной. При дальнейшем увеличении сдвиговых напряжений происходит попарное пересечение всех зависимостей  $J$  с образованием области напряжений, в которой положение этих кривых друг относительно друга изменяется на противоположное. Таким образом, в этой области, характеризующейся значениями сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy} \geq 2.4, 2.8, 2.5$  GPa для температур 300, 500, 700 К соответственно, скорость зарождения  $J$  может уменьшаться с ростом концентрации меди.

Для исследования влияния температуры на скорость зарождения  $J$  рассмотрим наклоны зависимостей  $J$ , соответствующих разным температурам (рис. 7). Как видно из рис. 7, a зависимости  $J$  не пересекаются в довольно большом диапазоне напряжений при  $T \geq 400$  К. Отсюда можно сделать вывод, что температура оказывает слабое влияние на чувствительность скорости зарождения  $J$  к напряжению. Этот результат косвенно подтверждается и в расчетах [21] с помощью другого потенциала [33], в которых кривые  $J$  для чистого алюминия при температурах 500 и 700 К тоже не пересекаются, что следует из значений активационных объемов  $V$ . В предположении о применимости экстраполяции по формуле (4) вне расчетного диапазона напряжений из данных рис. 7, a можно сделать вывод, что в области  $T \geq 400$  К скорость гомогенного зарождения дислокаций увеличивается с ростом температуры при всех сдвиговых напряжениях  $\sigma_{xy}$ . Следует отметить, что этот результат подтверждается результатами моделирования гомогенного зарождения в Mg при напряжениях ниже 1 GPa с помощью метода метадинамики [34].

На рис. 7, b и c на примере твердых растворов алюминия с 0.1 и 3 at.% меди показано, что наклон зависимостей  $J$  в твердых растворах с 0.1–3 at.% меди увеличивается с ростом температуры, что означает рост чувствительности  $J$  к напряжению. При продлении аппроксимаций в диапазоне  $\sigma_{xy} = 1.2–1.4$  GPa происходит пересечение кривых  $J$  для твердых растворов

алюминия с 0.1–3 at.% меди, соответствующих температурам 300–700 К. После пересечения зависимостей  $J$  их расположение меняется друг относительно друга



**Рис. 7.** Зависимость скорости зарождения дислокаций от сдвигового напряжения в чистом алюминии (а) и твердых растворах алюминия с 0.1 (b) и 3 at.% меди (c) при температурах 300 (1), 400 (2), 500 (3), 600 (4), 700 К (5).

на обратное. Следовательно, при сдвиговых напряжениях  $\sigma_{xy}$ , больших этого диапазона, скорость зарождения  $J$  увеличивается с ростом температуры, а при  $\sigma_{xy}$ , меньших этого диапазона, становится немонотонной функцией температуры. В области напряжений, в которой наблюдается смена температурного режима, значения скорости зарождения  $J$  составляют менее  $10^2 \text{ s}^{-1}$ , что невозможно получить с помощью прямых МД-расчетов. При этом указанные значения достаточно далеки от полученных численно ( $10^4$ – $10^6 \text{ s}^{-1}$ ), чтобы можно было с уверенностью говорить об их справедливости. Для того чтобы проверить результаты по аномальной температурной зависимости  $J$  в твердых растворах алюминия с медью при напряжениях ниже 1.4 GPa, следует провести расчеты, аналогичные выполненным в работе [33].

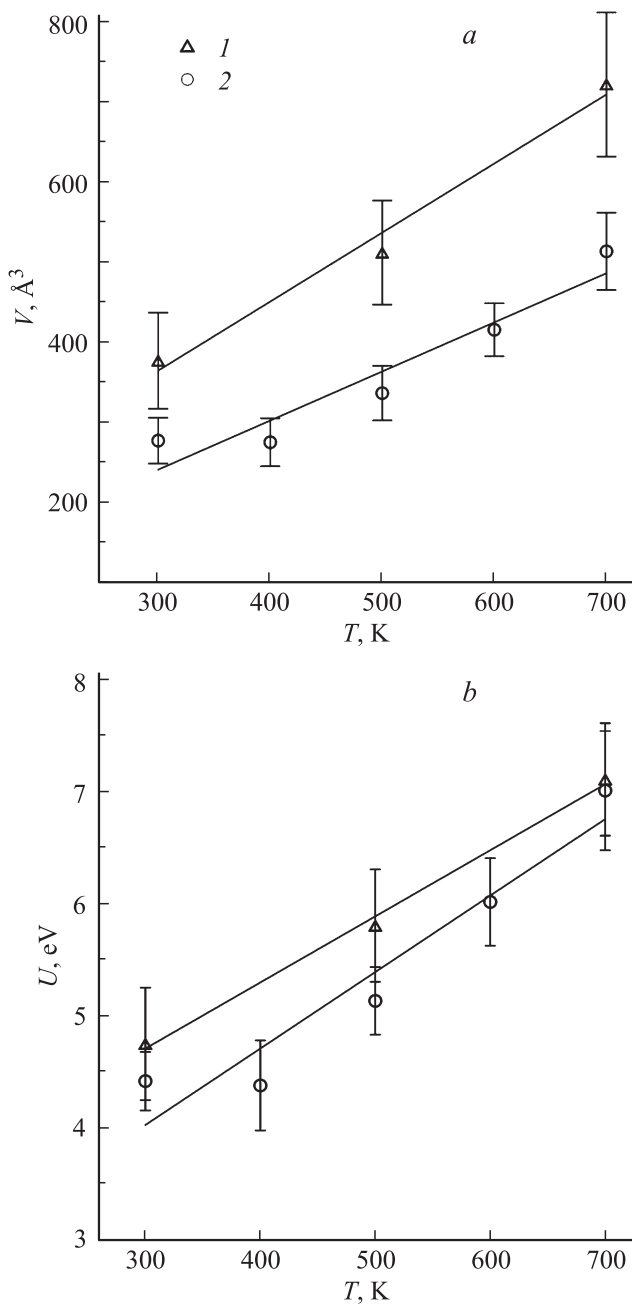
3.2. Активационные параметры скорости зарождения дислокаций. На рис. 8, а и b проведено сравнение активационных параметров (объема  $V$  и энергии  $U$  соответственно) при гомогенном зарождении в алюминии с результатами работы [21]. Рассчитанные в настоящей работе значения активационного объема  $V$  ниже на 25–30% аналогичных значений, полученных в работе [21] с помощью потенциала EAM [33] (рис. 8, а). При этом значения энергий активации  $U$  находятся в согласии с результатами работы [21] (рис. 8, b). Различие активационных объемов  $V$  в данном исследовании и работе [21] связано с использованием разных потенциалов [21,32]. Для проверки точности того или иного потенциала, по-видимому, необходимо проводить сравнение с соответствующими расчетами методами квантовой механики.

Активационные параметры, полученные при аппроксимации  $J$  в твердых растворах алюминия с медью, представлены на рис. 9. Различие между активационными объемами или энергиями при разном содержании меди начинает заметно проявляться при температурах более 400 К. При этом с увеличением концентрации меди значения  $U$  и  $V$  уменьшаются.

Хотя температурные зависимости активационных параметров хорошо аппроксимируются линейными зависимостями в твердых растворах алюминия с 0.1–1 at.% меди, мы рассмотрели и более высокие концентрации в исследованном диапазоне температур. Чтобы оценить степень изменения активационных параметров с температурой, были рассчитаны тангенсы угла наклонов полученных прямых. В твердых растворах алюминия с 0.1, 0.5, 1.0, 3 и 5 at.% меди значения тангенсов для зависимостей активационного объема  $V$  оказались равными 0.94, 0.96, 0.71, 0.65 и 0.25  $\text{\AA}^3/\text{K}$  (прямые 2–б на рис. 9, а), а для  $U$  — 131кВ, 133кВ, 99кВ, 88кВ и 39кВ (прямые 2–б на рис. 9, b). При их сравнении с аналогичными величинами для чистого алюминия: 0.61  $\text{\AA}^3/\text{K}$  и 80кВ (кривые 1 на рис. 9, а и b) оказалось, что рост  $U$  и  $V$  в зависимости от температуры в растворах с 0.1–3 at.% меди более сильный, чем в чистом алюминии, а в растворе с 5 at.% меди более слабый.

Экспериментальные значения активационных параметров зарождения дислокаций получены методом на-

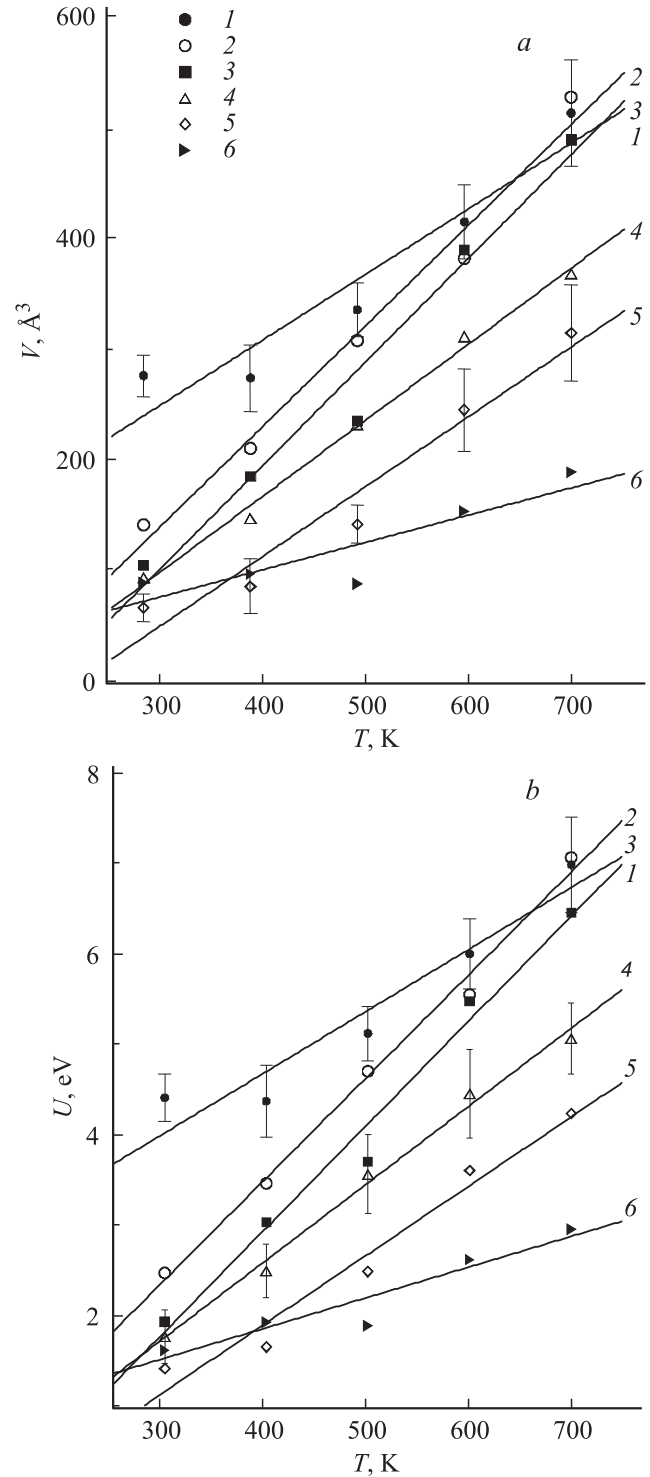




**Рис. 8.** Температурные зависимости активационных объемов  $V$  (a) и энергий активации  $U$  (b) в чистом алюминии согласно данным [21] (1) и данным настоящей работы (2). Сплошные линии — линейная аппроксимация. Вертикальные отрезки обозначают погрешность вычислений, методика определения которой описана в подразделе 2.3.

ноиндентирования на основе статистического анализа с использованием формулы (4). В отличие от настоящей работы, в которой величина  $J_0$  полагалась равной  $10^{15} \text{ s}^{-1}$ , в некоторых экспериментах  $J_0$  являлась определяемой величиной. Далее представлены экспериментальные данные по некоторым материалам, имеющими сходную с алюминием ГЦК-решетку. Величину  $V$  удобно выразить в приведенном ви-

де, поделив на на объем ГЦК-ячейки  $a^3$ . Активационные параметры в платине составили  $J_0 \approx 3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ,  $U = 0.28 \text{ eV}$ ,  $V = 10.2 \text{ \AA}^3$  ( $0.17a^3$ ) [6]; в  $\text{Ni}_3\text{Al}$  величина



**Рис. 9.** Температурные зависимости активационных объемов  $V$  (a) и энергий активации  $U$  (b) в твердом растворе алюминия с медью: 0 (1), 0.1 (2), 0.5 (3), 1 (4), 3 (5) и 5 at.% Cu (6). Сплошные линии — линейная аппроксимация. Вертикальные отрезки — погрешность вычислений по методике, описанной в подразделе 2.3.

$V = 23.5 \text{ \AA}^3 (0.51a^3)$ , а параметры  $J_0$  и  $U$  получены в виде  $\mu = J_0 \exp(-U/k_B T) \approx 4.6 \cdot 10^{-20} \text{ s}^{-1}$  [7]. В сплаве FeCoCrNiMn  $U = 1.72 \pm 0.35 \text{ eV}$  и  $V = 34 \pm 7 \text{ \AA}^3 (0.75a^3)$  [8].

В настоящей работе при  $T = 300 \text{ K}$  значения  $V$  в алюминии с содержанием Cu от 0.1 до 5 at.% изменялись в диапазоне от 60 до  $150 \text{ \AA}^3 ((0.95-2.25)a^3)$ . В сплаве Al с 0.3 at.% Cu  $\mu \approx 10^{-17} \text{ s}^{-1}$  ( $U \approx 1.6 \text{ eV}$ ). Эти величины более близки к экспериментальным, чем аналогичные значения, полученные в алюминии при гомогенном зарождении в настоящей работе:  $\mu \approx 10^{-56} \text{ s}^{-1}$ ,  $V = 275 \text{ \AA}^3 (4.1a^3)$ , а также в работе [21]:  $\mu \approx 10^{-53} \text{ s}^{-1}$ ,  $375 \text{ \AA}^3 (5.7a^3)$ .

Экспериментальные значения активационных объемов составляют 1–3 атомных объема, что, по мнению авторов работ [6–8], свидетельствует о механизме зарождения дислокации, связанном с движением вакансий или примесных атомов. Полученные в настоящей работе активационные объемы содержат большее количество атомов (от 4 до 9), которое, как видно из рис. 1, а, примерно составляет размер первоначального зародыша. Скорее всего, зарождение дислокаций при наноиндентировании связано с присутствием не только примесных атомов, но еще и других дефектов, возможно и вакансий.

## 4. Заключение

В настоящей работе на основе молекулярно-динамических расчетов исследован механизм зарождения дислокационной петли частичной дислокации в твердых растворах алюминия с медью. Показано, что формированию дислокационной петли предшествует образование наноразмерного локального структурного перехода ГЦК–ГПУ-типа, в котором атомы сдвинуты друг относительно друга на половину величины вектора Бюргерса частичной дислокации.

С помощью метода определения среднего времени жизни метастабильного состояния на основе молекулярно-динамических расчетов получены зависимости скоростей зарождения дислокаций от сдвиговых напряжений в чистом алюминии и твердом растворе алюминия с медью (0.1, 0.5, 1, 3 и 5 at.% Cu) при температурах 300, 400, 500, 600, 700 K. Рассчитанные зависимости скоростей зарождения дислокаций аппроксимированы в аррениусовском виде с найденными значениями активационных параметров (энергии активации и активационного объема).

В результате расчетов было установлено, что скорость зарождения дислокаций растет с увеличением концентрации меди от 0.1 до 3 at.% в области значений сдвиговых напряжений, меньших 2.05, 1.8, 1.9 GPa для температур 300, 500 и 700 K. Выполненные экстраполяции позволили предположить, что при напряжениях, больших 2.4, 2.8, 2.5 GPa, для этих же температур указанная зависимость становится обратной.

Обнаружено, что чувствительность скорости зарождения дислокаций к сдвиговому напряжению в чистом

алюминии практически не изменяется с ростом температуры. В твердых растворах алюминия с медью такая зависимость нарушается, и чувствительность возрастает с ростом температуры. С помощью аппроксимаций сделано предположение, что при напряжениях менее 1.4 GPa монотонный рост скорости зарождения с температурой в твердых растворах алюминия с 0.1–3 at.% меди может сменяться немонотонной зависимостью.

Установлено, что наличие в алюминии примесных атомов меди уменьшает значения активационных параметров. Обнаружено, что зависимость активационных параметров от температуры в твердом растворе алюминия с 5 at.% меди более слабая, чем в чистом алюминии и в твердых растворах с меньшей концентрацией меди.

Авторы благодарны А.Ю. Куксину, А.Н. Якупчикову за полезные обсуждения и Г.И. Канелю за интерес к работе.

Расчеты проведены на суперкомпьютерах Ломоносов и Чебышев МГУ [35].

## Список литературы

- [1] D. Dew-Hughes, W.D. Robertson. *Acta Met.* **8**, 156 (1960).
- [2] E.V. Zaretsky, G.I. Kanel. *J. Appl. Phys.* **112**, 073 504 (2012).
- [3] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [4] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. *УФН* **115**, 3 (1975).
- [5] Т. Судзуки, Х. Ёсинага, С. Такеути. Динамика дислокаций и пластичность. Мир, М. (1989). 296 с.
- [6] C.A. Schuh, J.K. Mason, A.C. Lund. *Nature Mater.* **4**, 617 (2005).
- [7] P.C. Wo, L. Zuo, A.H.W. Ngan. *J. Mater. Res.* **20**, 489 (2005).
- [8] C. Zhu, Z.P. Lu, T.G. Nieh. *Acta Mater.* **61**, 2993 (2013).
- [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 (2009).
- [14] С.В. Бобылев, И.А. Овидько. *ФТТ* **50**, 617 (2008).
- [15] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, И.А. Овидько. *ФТТ* **43**, 42 (2001).
- [16] М.Ю. Гуткин, А.М. Смирнов. *ФТТ* **56**, 730 (2014).
- [17] М.Ю. Гуткин, А.Л. Колесникова, С.А. Красницкий, А.Е. Романов. *ФТТ* **56**, 695 (2014).
- [18] G. Henkelman, B.P. Uberuaga, H. Jonsson. *J. Chem. Phys.* **113**, 9901 (2000).
- [19] T. Zhu, J. Li, A. Samanta, A. Leach, K. Gall. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 025 502 (2008).
- [20] M.G. McPhie, S. Berbenni, M. Cherkaoui. *Comp. Mater. Sci.* **62**, 169 (2012).
- [21] Г.Э. Норман, А.А. Янилкин. *ФТТ* **53**, 1536 (2011).
- [22] S. Ryu, K. Kang, W. Cai. *Proc. Nat. Acad. Sci.* **108**, 5174 (2011).
- [23] Z. Li, R.C. Picu, R. Muralidhar, P. Oldiges. *J. Appl. Phys.* **112**, 034 315 (2012).

- [24] R.K. Rajgarhia, D.E. Spearot, A. Saxena. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **17**, 055 001 (2009).
- [25] N. Amigo, G. Gutierrez, M. Ignat. *Comp. Mater. Sci.* **87**, 76 (2014).
- [26] F. Apostol, Y. Mishin. *Phys. Rev. B* **83**, 054 116 (2011).
- [27] R. Fletcher, C.M. Reeves. *Comput. J.* **7**, 2, 149 (1964).
- [28] S.J. Plimpton. *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995).
- [29] G.E. Norman, V.V. Stegailov. *Mol. Simul.* **30**, 397 (2004).
- [30] M.P. Allen, D.J. Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Clarendon Press, Oxford (1990). 385 p.
- [31] S.G. Psakhie, K.P. Zolnikov, D.S. Kryzhevich. *Phys. Lett. A* **367**, 250 (2007).
- [32] S. Aubry, K. Kang, S. Ryu, W. Cai. *Scripta Mater.* **64**, 1043 (2011).
- [33] X.-Y. Liu, X. Wei, S.M. Foiles, J.B. Adams. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1578 (1998).
- [34] M. Uranagase, R. Matsumoto. *Phys. Rev. B* **89**, 224 103 (2014) .
- [35] V.V. Voevodin, S.A. Zhumatiy, S.I. Sobolev, A.S. Antonov, P.A. Bryzgalov, D.A. Nikitenko, K.S. Stefanov, Vad.V. Voevodin. *Open Systems J.* **7**, 36 (2012).