

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

Фомин Евгений Владимирович

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ И
МАЛОУГЛОВЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ГЦК МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ**

Специальность 1.3.3 (01.04.02) — Теоретическая физика

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, доцент
Майер Александр Евгеньевич

Челябинск — 2021

Оглавление

Введение.....	5
Глава 1. Линейные и поверхностные дефекты кристаллической решетки в металлах и сплавах и их поведение в процессе пластической деформации...	18
1.1. Дефекты кристаллической решетки в металлах	18
1.1.1. Пластическая деформация металлов	18
1.1.2. Дислокации в чистых металлах.....	21
1.1.3. Дислокации в сплавах	25
1.1.4. Границы зерен	30
1.1.5. Малоугловые симметричные границы зерен наклона.....	35
1.1.6. Движение границ зерен	38
1.2. Исследование пластической деформации металлов в рамках механики сплошной среды	42
1.2.1. Поле напряжения винтовой дислокации	43
1.2.2. Поле напряжения краевой дислокации	44
1.3. Исследование пластической деформации металлов методом молекулярной динамики	48
1.3.1. Уравнения движения частиц.....	50
1.3.2. Граничные условия.....	52
1.3.3. Измерение макропараметров молекулярно-динамической системы	54
1.3.4. Функции термостатирования и баростатирования.....	55
1.3.5. Потенциалы межатомного взаимодействия.....	59
Выводы по первой главе.....	61

Глава 2. Движение малоугловой границы зерна наклона (110) в ГЦК металлах	63
2.1. Теоретическая модель движения малоугловых границ зерен наклона.	63
2.2. Постановка задачи молекулярно-динамического моделирования движения малоугловых границ зерен наклона	72
2.3. Результаты молекулярно-динамического моделирования движения малоугловых границ зерен наклона	76
2.4. Результаты теоретической модели движения малоугловых границ зерен наклона	90
2.5. Параметрическое исследование	104
2.6. Влияние дислокационных взаимодействий	108
2.7. Влияние скорости деформации и размерные эффекты.....	110
Выводы по второй главе.....	113
Глава 3. Движение уединенной краевой дислокации и малоугловой симметричной границы зерна наклона (110) в твердом растворе атомов меди	116
3.1. Движение уединенной краевой дислокации в твердом растворе атомов меди в монокристалле алюминия.....	117
3.1.1. Молекулярно-динамическое моделирование движения дислокации в твердом растворе атомов меди	117
3.1.2. Взаимодействие движущейся краевой дислокации с атомами меди	119
3.1.3. Напряженное состояние в монокристалле алюминия с твердым раствором меди и краевой дислокацией.....	123
3.2. Движение малоугловой границы зерна наклона (110) в твердом растворе атомов меди в бикристалле алюминия	125

3.2.1. Постановка теоретической модели и молекулярно-динамического моделирования движения границ зерен в твердом растворе атомов меди	125
3.2.2. Результаты теоретического и молекулярно-динамического моделирования движения границ в твердом растворе атомов меди	127
Выводы по третьей главе	140
Глава 4. Движение дислокаций в алюминиево-медном сплаве упрочненным медными наноразмерными кластерами	143
4.1. Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия дислокации с наноразмерным кластером	143
4.1.1. Напряженное состояние молекулярно-динамической системы	149
4.1.2. Влияние размера кластера, конфигурации и концентрации атомов меди в кластере на характер упрочнения	157
4.2. Теоретическая модель взаимодействия дислокации с наноразмерным кластером меди.....	165
4.3. Сравнение результатов теоретической модели взаимодействия дислокации с наноразмерным кластером меди с данными молекулярно-динамического моделирования	178
4.4. Дискретная дислокационная динамика	188
Выводы по четвертой главе	195
Заключение	199
Список публикаций автора по теме диссертации.....	201
Список сокращений	203
Список литературы	204

Введение

Актуальность темы исследования. Исследование пластической деформации металлов до сих пор является невероятно актуальной задачей – этот процесс затрагивает физические явления на всех масштабных уровнях, начиная от атомарного уровня, заканчивая макроскопическим [1]. Основным механизмом пластической деформации является движение дислокаций [1-7] и их взаимодействие с другими дефектами кристаллической структуры [8-19].

Границы зерен (ГЗ) представляют собой один из самых распространенных дефектов кристаллической структуры. ГЗ в значительной степени определяют пластическую деформацию поликристаллических металлов [20-24]. ГЗ могут быть как источниками дислокаций, которые проникают в зерна поликристалла, так и барьером, затрудняющим перемещение дислокаций между зернами [7]. Движение ГЗ под действием внешних нагрузений также является частью пластической деформации в поликристаллах, вклад этого механизма зависит от размера зерен [25-27]. Существует множество экспериментальных и численных исследований, в которых изучаются различные свойства и характеристики ГЗ, например, их структура [28-42], энергия [31, 32, 35, 36, 39, 43-45], отклик на деформацию [33, 37, 44-50] возможные состояния ГЗ [30, 34-36, 38, 39, 42], зарождение дислокаций на ГЗ [33, 35-39]. Несмотря на это, ГЗ до сих пор остаются недостаточно изученным явлением. Это частично связано с тем, что существует множество конфигураций границ, и невозможно описать разнообразную структуру и поведение ГЗ в рамках простой теории. Большой прорыв в изучении границ зерен произошел вследствие развития методов атомистического моделирования, в частности молекулярной динамики (МД). Метод МД позволяет отслеживать внутренние процессы в кристаллах,

происходящие во время деформации [30-33, 35-39, 40, 44, 44, 48, 50], а также наблюдать за изменением кристаллической структуры [30, 31, 36, 37, 40]. Метод МД адекватно описывает пластическую деформацию металлов, данные моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами напрямую или с помощью промежуточной теоретической модели [51-53]. Влияние движения ГЗ на макроскопический отклик материала также исследуется методом конечных элементов с учетом теории пластичности, которая включает эффекты со стороны границ зерен [54, 55].

Создание сплавов является наиболее перспективным методом повышения прочности материалов за счет управления взаимодействием дислокаций и дефектов кристаллической структуры в процессе пластической деформации. Интерес к исследованию алюминиевых сплавов остается традиционно высоким, поскольку они сочетают в себе малый вес и достаточно высокие прочностные характеристики. Высокопрочные сплавы на основе алюминия с медью в качестве основного легирующего элемента в настоящее время рассматриваются как возможный материал для защиты космических аппаратов, изготовления самолетов и военной техники [56, 57]. Традиционный метод повышения прочности алюминиевых сплавов заключается в выдержке образцов в течение некоторого времени при повышенной температуре – это называется искусственным старением сплава. В зависимости от легирующих элементов и цели старения эти температуры и продолжительность обработки могут значительно различаться, но обычно требуются температуры в несколько сотен градусов по Цельсию и продолжительность более нескольких часов. В процессе старения образуются структурированные включения, которые выделяются из твердого раствора и в значительной степени обеспечивают прочность сплава. Однако и твердый раствор атомов обладает упрочняющими свойствами, так как затрудняет

движение дислокаций [58-59]. Осаждение упрочняющих фаз является результатом процессов термостимулированной диффузии, что объясняет его относительно низкую скорость и высокие температуры обработки. Для системы алюминий-медь упрочняющие фазы выделяются в следующей последовательности: пересыщенный твердый раствор, зоны Гинье-Престона (ГП), θ'' , θ' и θ фазы [60-64]. Образование небольших упрочняющих включений обеспечивает увеличение сдвиговой прочности алюминиево-медных сплавов, как это было экспериментально продемонстрировано в работах [65-67] и показано путем численного моделирования [68].

Актуальным является исследование процессов пластичности на разных масштабных уровнях. Атомистическое исследование в виде МД моделирования позволяет проследить основные закономерности процесса деформации и вычислить необходимые параметры. Данные МД моделирования могут быть основой для разработки теоретических моделей, которые могут быть параметризованы на основе данных атомистического моделирования. Разработанные и параметризованные модели используют в численных схемах крупномасштабного моделирования для теоретического исследования механических свойств металлов и сплавов на макроуровне.

Степень разработанности темы. Движение ГЗ в поликристаллах способствует как пластической релаксации, так и изменению микроструктуры; это следует учитывать при рассмотрении термомеханического отклика металлов. В процессе получения материалов методом аддитивных технологий [69], при отжиге золотых тонких пленок [70] наблюдается изменение среднего размера зерен, что подтверждается МД моделированием [71]. Мобильность границ часто исследуется на примере малоугловых границ наклона [72]. Доля малоугловых границ в реальных сплавах может быть достаточно высока. Структура малоугловых ГЗ описана в классической работе Рида и Шокли [29]. Она подтверждается на снове

уравнения Франка [34, 39] и с помощью атомистического моделирования [73]. Данная структура представляет собой набор периодически расположенных краевых дислокаций, которые лежат в эквивалентных плоскостях скольжения, если рассматривать одно из граничащих зерен, а наличие этих дислокаций приводит к наклону плоскостей скольжения между граничными зернами. Когда деформация сдвига приложена перпендикулярно плоскости границы, малоугловая ГЗ наклона может двигаться в этом же направлении путем скольжения зернограничных краевых дислокаций - это показано в экспериментальных работах [74-79] и численных исследованиях [24, 73, 80]. Движение ГЗ может зависеть от многих факторов, таких как наличие упрочняющих включений в материале [81], температуры [78], внешних дислокаций [20], угла разориентировки [73, 78] и оси наклона [80]. Мобильность границ может быть численно исследована с помощью решения уравнения движения для каждой зернограничной дислокации [20, 81] или с помощью анализа данных МД моделирования [73, 80]. Существует еще один часто исследуемый режим движения ГЗ, при котором деформация сдвига параллельна плоскости границы [31, 45, 50]. Миграция границ в этом случае объясняется образованием разъединений вдоль плоскости ГЗ. Многие работы по данной теме сосредоточены на наблюдении разъединений с использованием различных исследовательских подходов: моделирование в рамках механики сплошной среды [40, 71, 82, 83], атомистического моделирования [40, 71, 84, 85] и даже синтез атомистического моделирования с методом конечных элементов (квазиконтинуальные модели) [6, 33]. Большое внимание уделяется обобщению данных МД для быстрых процессов на случай гораздо более низких скоростей деформации [86, 87]. Во всех перечисленных работах исследуется механизм ползучести границы, который можно объяснить гомогенным и гетерогенным зарождением разъединений вдоль границы и образованием диполя

разъединения, что показано в [33, 82]. Природа движения разъединений также может быть объяснена теоретическими моделями, которые включают объемную и локальную диффузию вакансий в кристалле во время процесса ползучести [70, 71, 83]. С другой стороны, экспериментальные данные показывают, что движение ГЗ может происходить из-за взаимодействия зернограницных дислокаций с разъединениями [88].

В настоящее время широко распространен подход к описанию прочности сплава, учитывающий вклад в общую прочность сплава нескольких членов [8-19]: (1) сопротивление движению дислокаций со стороны кристаллической матрицы; (2) кинематическое деформационное упрочнение дислокациями леса и накопление дислокаций на препятствиях в виде петель Орована; (3) вклад ГЗ в прочность сплава; (4) упрочнение от твердого раствора; и (5) член, описывающий упрочнение наноразмерными включениями вторичных фаз. Для сплавов состаренных традиционным методом с расчетом на максимальные прочностные свойства, основной вклад в прочность дают включения. В литературных данных в основном различают две составляющие: от перерезаемых и неперерезаемых включений. Однако, имеется большое количество экспериментальных доказательств того, что даже такие прочные включения, как θ' фазы, могут быть перерезаны и, более того, растворены в алюминиевой матрице [89-96]. Все это стимулирует дальнейшее изучение процессов взаимодействия дислокаций с упрочняющими частицами.

Дислокация свободно движется в кристаллической решетке между процессами взаимодействия с упрочняющими включениями. В металлах и сплавах дислокации движутся в процессе сдвиговой деформации, что исследуется с помощью метода МД [52, 60, 68, 97-104, A2-A4]. Взаимодействие дислокаций со структурированными наноразмерными включениями, состоящими из атомов алюминия и меди, также изучалось в

последнее десятилетие с помощью МД расчетов [60, 52, 68, 97, 100-105]. В этих работах исследовалось взаимодействие дислокации с зонами ГП, θ'' , θ' и θ фазами. Взаимодействие дислокации с твердым раствором легирующих атомов в матрице тоже рассматривалось с помощью МД расчетов [58, 106-108, А2]. Перечисленные выше исследования показывают, что МД моделирование позволяет изучить основные закономерности и механизмы взаимодействия дислокации с упрочняющими включениями. В работах [68, 103, 105] был предложен многоступенчатый подход, сочетающий МД расчеты с последующей разработкой теоретических моделей движения дислокаций в рамках механики сплошной среды и обобщением результатов в схеме 2-мерной дискретной дислокационной динамики - это позволяет прогнозировать напряжение течения сплава в зависимости от фазового состава упрочняющих включений и их распределения по размерам. В этих исследованиях модель взаимодействия дислокации и включения была основана на механизме образования петли Орована вокруг него, что достаточно правильно описывает взаимодействие дислокации с крупными структурированными включениями меди в алюминиевой матрице. Однако, в работе [109] было продемонстрировано, что результаты дискретной дислокационной динамики завышают напряжение течения в сплавах бxxx с включениями в системе Al-Mg-Si. Чтобы обойти это противоречие, авторы ввели модель перерезаемых включений, которая более уместна из-за меньшего сопротивления сдвигу таких фаз.

В работе [110] предложен новый способ обработки алюминиевых сплавов циклическим механическим нагружением. Этот метод приводит к выделению кластеров размером 1-2 нм из атомов легирующих элементов; данные кластеры не имеют собственной кристаллической структуры. Для сплавов, не подвергавшихся предварительному старению, выделение таких кластеров происходит по всему объему образца [110]. В случае

предварительно состаренного сплава кластеры образуются вблизи границ зерен, где мала плотность структурированных упрочняющих фаз [111]. Использование метода циклического нагружения позволило получить сплавы с повышенной прочностью, пластичностью и усталостной прочностью по сравнению со сплавами после традиционной обработки. Хотя исследование эффекта упрочнения от сферических кластерных включений проводится как экспериментально, так и численно, в существующих работах не рассматривается детальная кинетика взаимодействия дислокации с кластером. В статье [112] феноменологическая макроскопическая модель построена на основе экспериментальных данных. В работе [113] авторы рассматривают взаимодействие дислокаций и кластеров методом дискретной дислокационной динамики, однако в исследовании используют силу сопротивления на основе МД расчетов. На атомистическом уровне также рассматривается упрочнение от пар атомов в различных конфигурациях [99], но эти результаты не распространяются на упрочнение от кластеров.

Цель диссертационной работы состоит в теоретическом исследовании движения уединенной краевой дислокации и малоугловой ГЗ наклона как совокупности краевых дислокаций в чистых ГЦК металлах (алюминии, меди и никеле) и в алюминиево-медных сплавах (твердый раствор меди в алюминиевой матрице и сплав с наноразмерными медными кластерами), а также в разработке соответствующих теоретических моделей.

Задачи диссертационной работы:

1. Проведение численного эксперимента на основе метода МД по исследованию движения малоугловых границ зерен наклона в алюминии, меди, никеле и твердом растворе атомов меди в алюминиевом кристалле.
2. Проведение численного эксперимента на основе метода МД по исследованию движения уединенной краевой дислокации в твердом растворе

атомов меди в алюминиевом кристалле и алюминии с наноразмерными медными кластерами.

3. Разработка теоретической модели движения ГЗ как совокупности дислокаций и её верификация и параметризация на основе данных МД моделирования.

4. Разработка теоретической модели движения краевой дислокации в алюминиево-медном сплаве с наноразмерными медными кластерами и её применение в схеме двумерной дискретной дислокационной динамики для перехода на макроскопический уровень и сравнения с экспериментальными данными.

Методы исследования. Для разработки теоретической модели движения ГЗ и уединенной дислокации использовался аппарат механики сплошной среды, где сдвиговое напряжение, действующее на каждую зернограничную дислокацию, определяется с учетом локального распределения напряжений в кристалле [98]. В случае ГЗ, также учтены силы междислокационного взаимодействия [114]. Численный эксперимент в диссертационной работе реализован с помощью метода классической МД в программном пакете LAMMPS [115]. Начальные атомные структуры создавались в программе ATOMSK [116]. Визуализация атомных структур, анализ кристаллической решетки и поиск дефектов проводился в программном пакете OVITO [117], в частности, поиск дислокаций производился с помощью алгоритма DXA [118]. Для подбора параметров теоретической модели в соответствии с данными МД моделирования применен алгоритм Байеса. Теоретическая модель движения краевой дислокации в алюминии с наноразмерными кластерами меди основана на рассмотрении движения дислокаций и её взаимодействия с препятствиями в рамках механики сплошной среды и параметризована на данных МД

моделирования. Проведено её обобщение в виде двумерной дискретной дислокационной динамики ранее апробированной в работах [68, 103, 105].

Научная новизна:

1. Впервые разработана теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона как совокупности краевых дислокаций с учетом следов пластической релаксации напряжений за движущимися дислокациями и взаимодействия между каждой дислокацией в системе. Модель разработана и верифицирована на основе данных МД моделирования.

2. Впервые показаны три стадии движения ГЗ дислокаций соответствующие различному распределению напряжений вблизи ГЗ. Существование этих стадий наблюдается также в численном МД эксперименте.

3. Впервые на основе теоретической модели установлена стадия быстрого движения ГЗ, которая возникает из-за неоднородного распределения напряжений в кристалле.

4. Впервые применена теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона как совокупности краевых дислокаций для случая движения ГЗ в алюминиевом кристалле с твердым раствором меди.

5. Впервые разработана теоретическая модель динамического преодоления дислокацией перерезаемых и неперерезаемых наноразмерных медных включений. Показано, что модель предсказывает напряженное состояние экспериментально полученного перспективного алюминий-медного сплава AA2024, упрочненного кластерами нанометрового размера, сформированными в результате циклического нагружения.

Научная и практическая значимость работы. Разработанные теоретические модели, верифицированные и параметризованные на основе данных МД моделирования, могут далее использоваться в многомасштабном

моделировании поведения материала. Для перехода на более высокий масштабный уровень, теоретическая модель может быть включена в качестве подмодели в дискретную дислокационную динамику, другой сеточный или бессеточный численный метод решения уравнений механики сплошной среды.

Достоверность результатов обеспечивается на всех этапах исследований приведенных в диссертационной работе. Результаты теоретических моделей сравниваются с данными, полученными из численного эксперимента (МД), или с натурными экспериментами, что также верифицирует полученные в диссертации результаты. В части МД расчетов достоверность поддерживается использованием программных комплексов и методов атомистического моделирования, которые давно доказали свою эффективность и точность. Основой теоретических моделей является механика сплошной среды и уравнения, связывающие движения дислокаций с пластическими деформациями, которые также хорошо апробированы.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на следующих конференциях: LIX Международная конференция «Актуальные проблемы прочности» (Тольятти, 2017); XXXIII International Conference on Equations of State for Matter (Кабардино-Балкария, 2018); XLIV Международная молодёжная научная конференция «Гагаринские чтения» (Москва, 2018); 2nd International Conference on Structural Integrity and Durability - ICSID 2018 & Summer School - Fatigue and Fracture Modelling and Analysis (Дубровник, Хорватия, 2018); XXXIV International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Кабардино-Балкария, 2019); VI International Conference on Particle-Based Methods - PARTICLES 2019 (Барселона, Испания, 2019); Международная конференция «Математическое Моделирование в Естественных Науках» (Пермь, 2020); XXXVI International Conference on Equations of State for Matter (Кабардино-Балкария, 2021);

Международный симпозиум «Перспективные Материалы и Технологии» (Минск, Беларусь, 2021); Международная конференция «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии» (Томск, 2021).

Публикации. Результаты диссертационной работы опубликованы в 10 публикациях, в числе которых 5 статей в научных журналах, которые рекомендованы ВАК РФ или приравненные к ним.

Личный вклад автора. Автор непосредственно создавал МД модели бикристаллов чистого алюминия, меди, никеля и бикристалла алюминия с твердым раствором атомов меди; проводил моделирование сдвиговой деформации перечисленных систем методом МД и анализировал полученные результаты. Автор совместно с Красниковым В.С. проводил МД моделирование сдвиговой деформации систем с уединенной дислокацией в алюминиевом кристалле с твердым раствором атомов меди и медным кластером. Разработка теоретических моделей проводилась автором совместно с Майером А.Е. Вклад автора в представленные в диссертации результаты является определяющим.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа содержит введение, четыре главы, заключение, публикации автора и список литературы. Объем диссертации составляет 222 страниц, при этом объем цитируемых источников - 155 ссылок.

Результаты и положения, выносимые на защиту:

1. Теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона как совокупности краевых дислокаций с учетом локального распределения напряжений в кристалле и междислокационных взаимодействий. Учет этих факторов позволяет описать стадии движения ГЗ, связанные с изменением профиля локальных напряжений, а так же изменение формы ГЗ в ходе её

движения, связанное с междислокационным взаимодействием. Упрощенная теоретическая модель движения ГЗ (без учета междислокационных сил и решения уравнения движения только относительно среднего положения ГЗ) в случае чистых ГЦК металлов дает приемлемые результаты в сравнении с численным МД экспериментом.

2. Существование стадии быстрого движения ГЗ, соответствующей ситуации, когда зона пластически отрелаксированных напряжений в окрестности дислокации больше не увеличивается. При этом релаксация средних напряжений не снижает скорость ГЗ, что позволяет зернограничным дислокациям быстро проходить большие расстояния в кристалле. Эта стадия особенно четко проявляется для субмикроструктурных и микроструктурных зерен.

3. Атомы твердого раствора повышают напряжения, необходимые для движения дислокации примерно в 8.5 раз для случая 0.5 % концентрации растворенных атомов. Преодоление зон высокой концентрации растворенных атомов осуществляется за счет перерезания или ползучести. Движение малоугловой ГЗ наклона в твердом растворе можно описать, используя теоретическую модель движения ГЗ для чистого алюминия, с повышением предела текучести и модуля сдвига по сравнению с чистым алюминием.

4. Теоретическая модель движения дислокации в алюминии с наноразмерными кластерами меди, которая учитывает как возможность перерезания, так и обхода нанокластера с образованием петли Орована. Параметры теоретической модели идентифицируются методом Байеса на данных численного МД эксперимента. Теоретическая модель и МД моделирование показывают, что дислокация при взаимодействии перерезает кластеры до 1.2 нм включительно или обходит путем образования петли Орована кластеры больших размеров.

5. Теоретическая модель движения дислокации в алюминии с наноразмерным кластером меди, обобщается в схеме двухмерной дискретной дислокационной динамики для перехода на мезомасштабный уровень. Полученные результаты показывают хорошее соответствие с экспериментальными данными по сдвиговым напряжениям (порядка 220 МПа) для сплава АА2024, упрочненного кластерами нанометрового размера, сформированными в результате циклического нагружения.

Глава 1. Линейные и поверхностные дефекты кристаллической решетки в металлах и сплавах и их поведение в процессе пластической деформации

1.1. Дефекты кристаллической решетки в металлах

1.1.1. Пластическая деформация металлов

Пластическая деформация металлов и сплавов происходит в основном за счет движения дислокаций (рисунки 1.1 – 1.2), а упрочнение определяется их взаимодействием друг с другом и с остальными дефектами кристаллической решетки (границы зерна, двойники, включения и т.д., что показано на рисунке 1.3) [1-19]. Есть еще один распространенный механизм пластической деформации - двойникование [рисунок 1.1(б)], но в сравнении со скольжением дислокаций он проявляет себя намного менее интенсивно (около 1-4 %) [1]. В соответствии с особенностями скольжения дислокаций выделяют три основных этапа пластических деформации:

1. Стадия одиночного скольжения;
2. Стадия множественного скольжения;
3. Параболическая стадия.

Первая стадия (I на рисунке 1.4) характеризуется скольжением дислокаций в одной системе скольжения и развитием тонких и длинных линий скольжения. В течение этой стадии плотность дислокаций растет не очень сильно – препятствий для движения дислокаций много меньше, чем на других стадиях скольжения.

Стадия множественного скольжения (II на рисунке 1.4) начинается с активации нескольких систем скольжения в кристалле, что ведет к множественному взаимодействию дислокаций из разных систем скольжения. Плотность дислокаций увеличивается на 4-5 порядков в сравнении с

исходным значением. Также на этой стадии происходит фрагментация полос скольжения [рисунок 1.2(б)] из-за скоплений дислокаций.

Последняя стадия - параболическая (III на рисунке 1.4). Вследствие больших деформаций возникает деформационное упрочнение: начинается поперечное скольжение, происходит ощутимая аннигиляция дислокаций, за счет чего плотность дислокаций выходит на стационарный уровень.

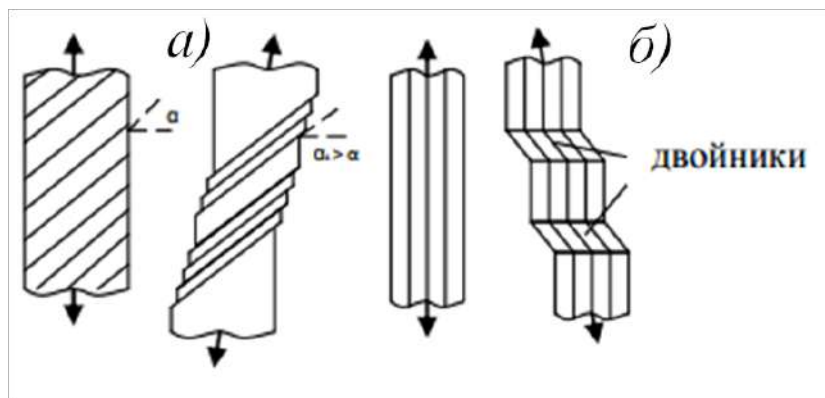


Рис. 1.1. Основные механизмы пластической деформации в металлах: (а) - скольжение дислокаций, (б) - двойникование [119].

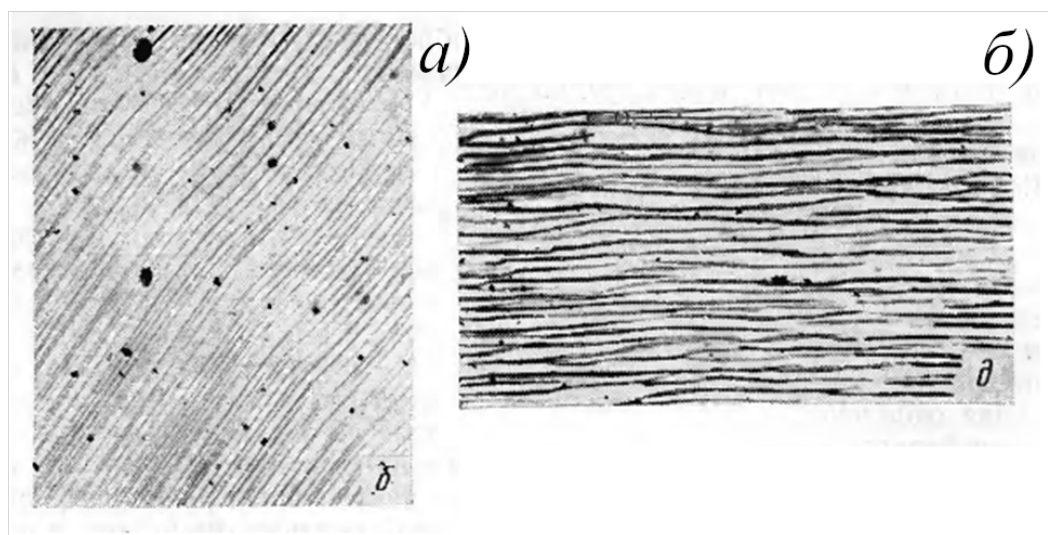


Рис. 1.2. Поверхностные линии скольжения дислокаций на различных стадиях деформации для случая алюминиевого кристалла: (а) – начало интенсивного скольжения, (б) – конец стадии множественного скольжения и фрагментация полос скольжения [119].

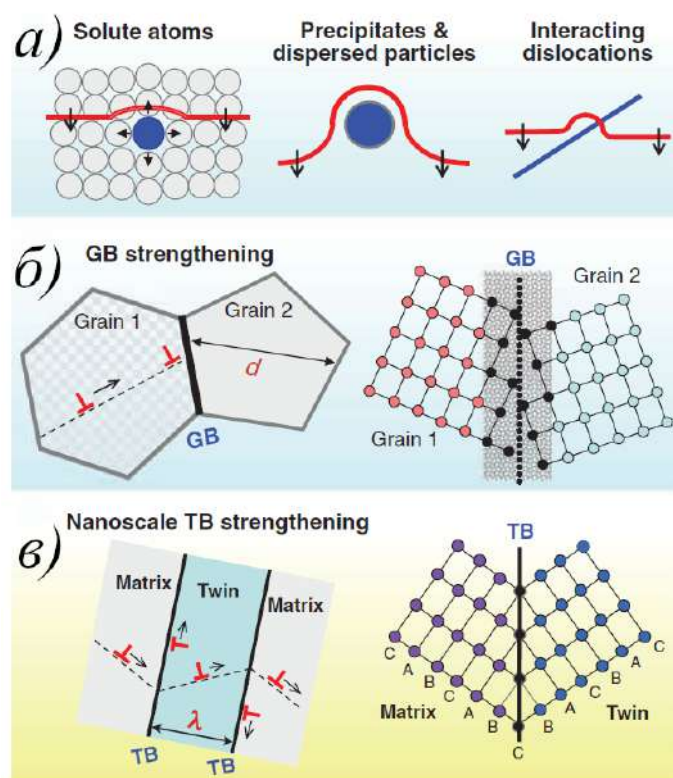


Рис. 1.3. Основные механизмы упрочнения в металлах [120]: (а) – взаимодействие дислокации с точечными дефектами, включениями и другими дислокациями; (б) – взаимодействие дислокации с границами зерен; (в) – взаимодействие дислокаций с двойниками.

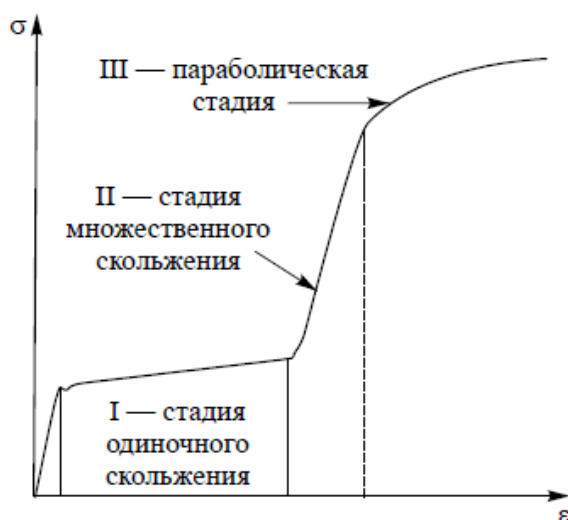


Рис. 1.4. Стадии скольжения дислокаций, связанные с пластическим деформированием металлов [1].

1.1.2. Дислокации в чистых металлах

До того как внутренняя структура материалов уже была хорошо изучена, исследователи столкнулись с проблемой, что прочность металлов, рассчитанная теоретически ($\approx 0.1G$) в 10-100 раз отличается от прочности, наблюдаемой в экспериментах. Эта проблема была решена путем введения в теорию линейных дефектов - так называемых дислокаций, которые затем были обнаружены и в экспериментах (рисунок 1.5). Стало понятно, что деформация происходит не путем смещения всей атомной плоскости относительно другой, а передвижением локального линейного дефекта, что более энергетически выгодно. Дальнейшие исследования показали, что в металлах основным источником пластических деформаций являются движение дислокации [3], поэтому так важно понимать их поведение.

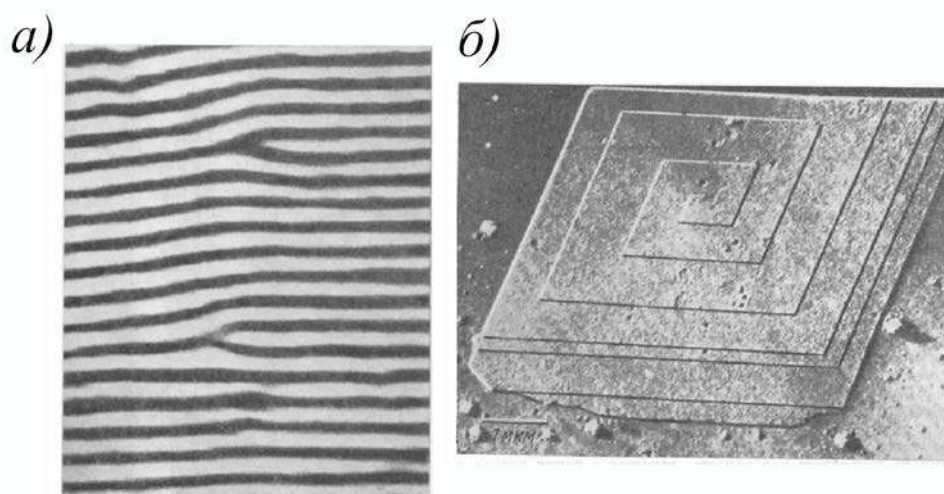


Рис. 1.5. (а) электронная просвечивающая микроскопия перекрывающихся слоев $\{111\}$ палладия и золота показывающая наличие дислокаций [2]; (б) - дислокация оставляет за собой след скольжения при росте кристалла [2].

Существуют два основных типа дислокаций – винтовые и краевые. Краевая дислокация представляет собой край лишней полуплоскости в идеальной кристаллической решетке (рисунок 1.6). Вектор Бюргерса

дислокации направлен по направлению сдвига относительно вектора трансляции решетки.

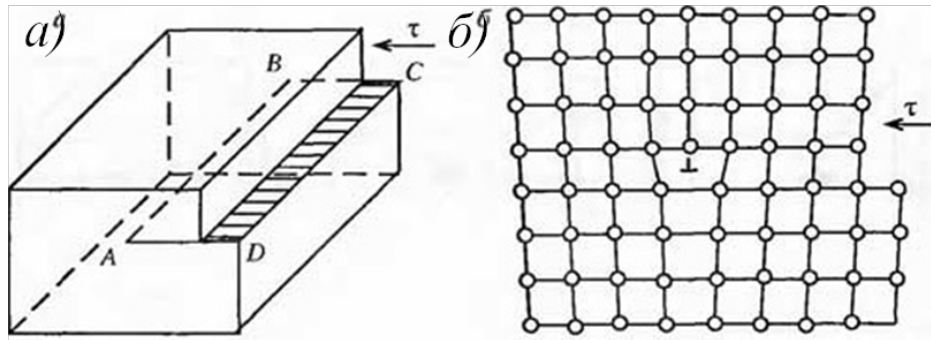


Рис. 1.6. Краевая дислокация: (а) схема движения дислокации в кубическом кристалле; (б) схематичное изображение дислокации в кристаллической структуре кубической решетки [121].

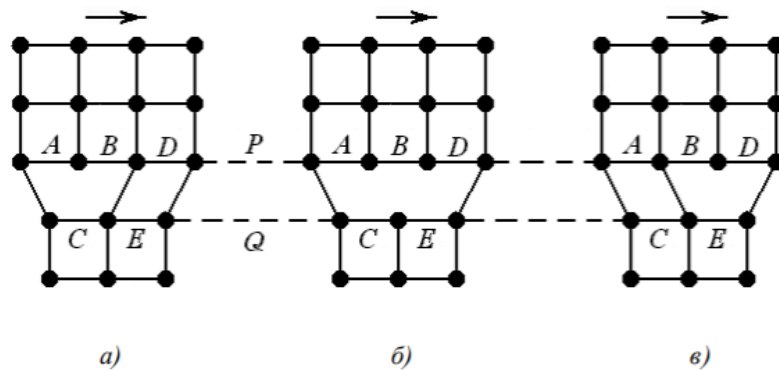


Рис. 1.7. Поэтапное движение краевой дислокации в кристалле [121]: (а) – разрыв первой атомной связи по направлению движения дислокации, (б) – разрыв обеих связей около дислокации, (с) – перемещение самой дислокации на следующую атомную плоскость по направлению сдвига.

Движение дислокации происходит поэтапно и затрагивает только атомы и их связи вокруг самой дислокации. Под действием сдвига атомы вокруг дислокации теряют связи, и дислокация переходит на следующую атомную плоскость перпендикулярно сдвигу (рисунок 1.7). Такой процесс более энергетически выгоден, чем движение всей атомной плоскости.

Второй базовый тип дислокаций в металлах – винтовая дислокация (рисунок 1.8). Винтовая дислокация, в отличие от краевой, распространяется перпендикулярно сдвигу. Данный тип дислокации получил свое название из-за фактического наличия атомной плоскости, которая закручена как винтовая лестница - рисунок 1.8(в). Основное отличие поведения винтовой дислокации в том, что у нее нет выделенной плоскости скольжения, как у краевой дислокации. Скольжение винтовой дислокации происходит по любой проходящей через неё кристаллографической плоскости под действием сдвигового напряжения.

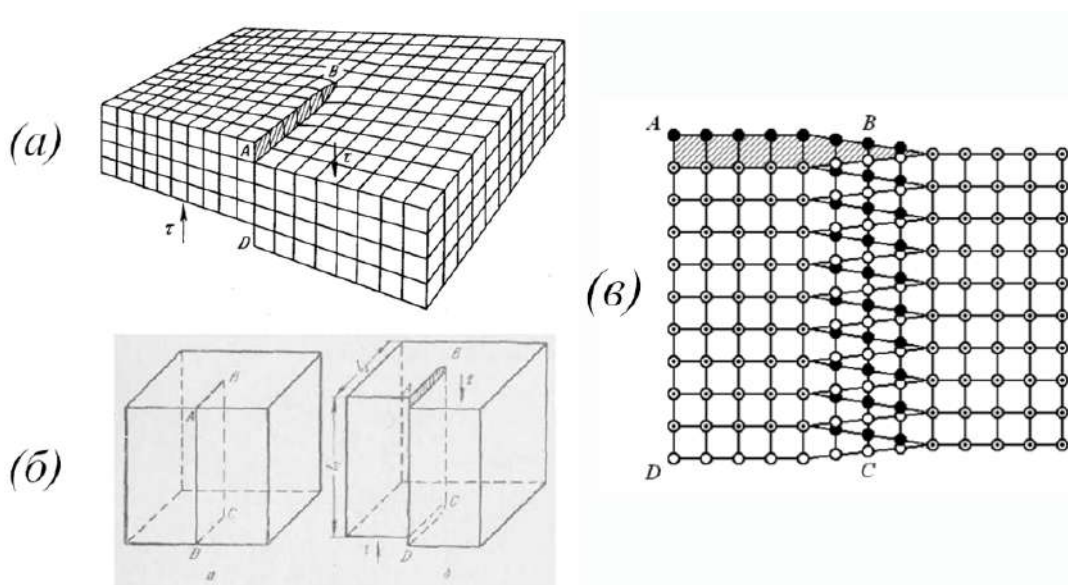


Рис. 1.8. Винтовая дислокация [121]: (а) – схема краевой дислокации в кубическом кристалле, (б) – движение винтовой дислокации перпендикулярно сдвигу, (в) – расположение атомов в винтовой дислокации.

Краевые и винтовые дислокации, рассмотренные выше, представляют собой примеры идеальных линейных дефектов в кубической решетке. В ГЦК структурах чаще всего образуются частичные дислокации, системы скольжения которых находятся в плоскостях плотной упаковки кристалла. Изначально этот факт был объяснен с использованием модели твердых сфер [рисунок 1.9(в)] – на рисунке видно, что полную дислокацию $\frac{1}{2}[\bar{1}01]$ можно

разделить на две составляющие, $\frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$ и $\frac{1}{6}[\bar{2}11]$, которые меньше деформируют сферы на своем пути [2]. Также, это положение подтверждает и энергетический критерий Франка, в котором предполагается, что энергия дислокации пропорциональна квадрату вектора Бюргерса, и, соответственно, оценивает возможность реакции расщепления дислокаций как выполнения следующего условия:

$$\left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2 > \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2, \quad (1.1)$$

где a - период решетки.

В ГЦК кристаллах существует 12 систем скольжения дислокаций, их можно записать в виде тетраэдра Томпсона [рисунок 1.9(б)], который представляет собой развертку единичной кристаллической ГЦК ячейки в плоскости плотной упаковки (111). Каждая полная дислокация в кристалле фактически скользит под действием сдвига как растянутая дислокация - полная дислокация $\frac{1}{2}[\bar{1}01]$ разбивается на лидирующую дислокацию Шокли $\frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$ и замыкающую дислокацию Шокли $\frac{1}{6}[\bar{2}11]$, между которыми находится дефект упаковки (рисунок 1.10).

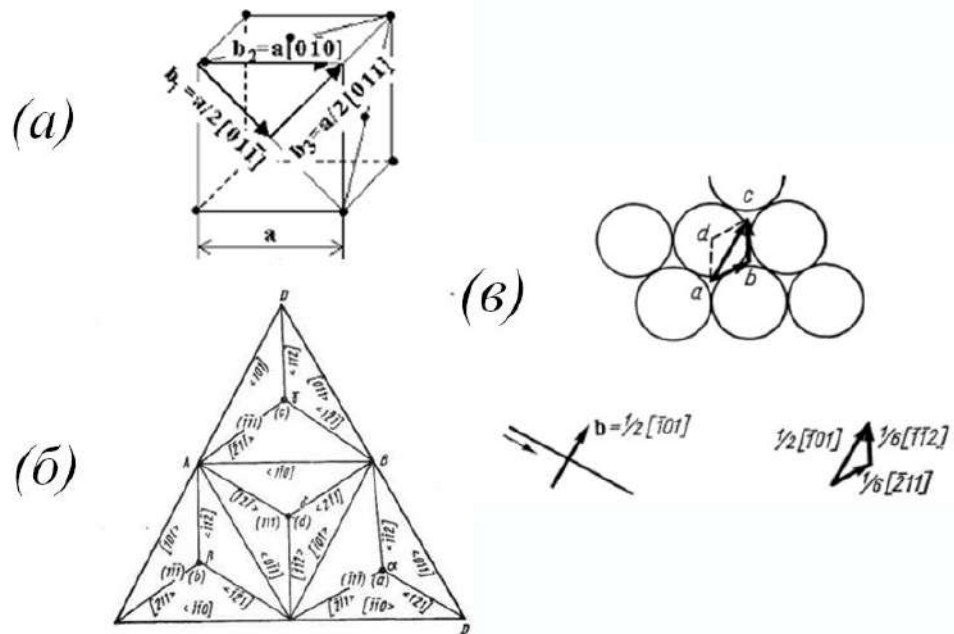


Рис. 1.9. Плоскости скольжения дислокаций в ГЦК структурах: (а) – вектора Бюргерса и направления скольжения полных дислокаций; (б) – тетраэдер Томпсона, (в) - расщепление полной дислокации на две частичные дислокации Шокли в ГЦК структуре [2].

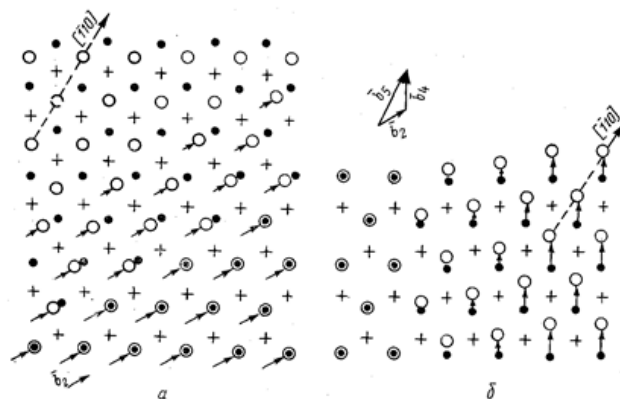


Рис. 1.10. Движение полной дислокации, как растянутой дислокации состоящей из лидирующей и замыкающей дислокаций Шокли в ГЦК металлах [2].

1.1.3. Дислокации в сплавах

В сплавах после процедуры старения начинается выделение структурированных фаз из твердого раствора атомов легирующих веществ в

основной матрице кристалла (рисунок 1.11). Выделяют разные типы включений, каждое из которых обладает своими размерами, формой, элементарной ячейкой и упрочняющими свойствами [63]. В случае пластической деформации, движение дислокаций будет затруднено взаимодействием с разными типами включений и твердым раствором атомов. Влияние этих факторов на напряженное состояние материала во время деформации достаточно сильно [97, 107], что видно из рисунка 1.12 - каждое взаимодействие проявляется на кривой сдвигового напряжения. Более детально взаимодействие краевой дислокации и включения предоставлено на рисунке 1.13. Взаимодействие приводит к возникновению петли Орована вокруг препятствия. После нескольких взаимодействий структура самого включения меняется [68].

Взаимодействие дислокации с твердым раствором достаточно сложный процесс – дислокация находится в постоянном контакте с растворенными атомами. Например, в работе [58], показано, что есть два режима движения дислокации в твердом растворе атомов Ni в матрице Cu – в первом режиме атомы никеля действуют как препятствия движению дислокаций и дислокация движется медленнее, чем в чистой меди, рисунок 1.14(а, в); второй режим движения возникает, когда сдвиговые напряжения превышают некоторое критическое значение и дислокация в твердом растворе начинает двигаться быстрее, чем в чистой меди, рисунок 1.14(б, г). Данное поведение связано с характером изменения скорости звука в твердом растворе Cu-Ni. Моделирование ДДД [59] также показывает, что присутствие растворенных атомов Ni в матрице Cu увеличивает скорость пластической деформации за счет движения дислокаций, кроме того, учет междислокационных взаимодействий дает не такое быстрое насыщение скорости пластической деформации в отличие от случая невзаимодействующих дислокаций –

рисунок 1.15. Особенности движения дислокации в твердом растворе Cu в матрице Al затронуты в 3-й главе настоящей работы.

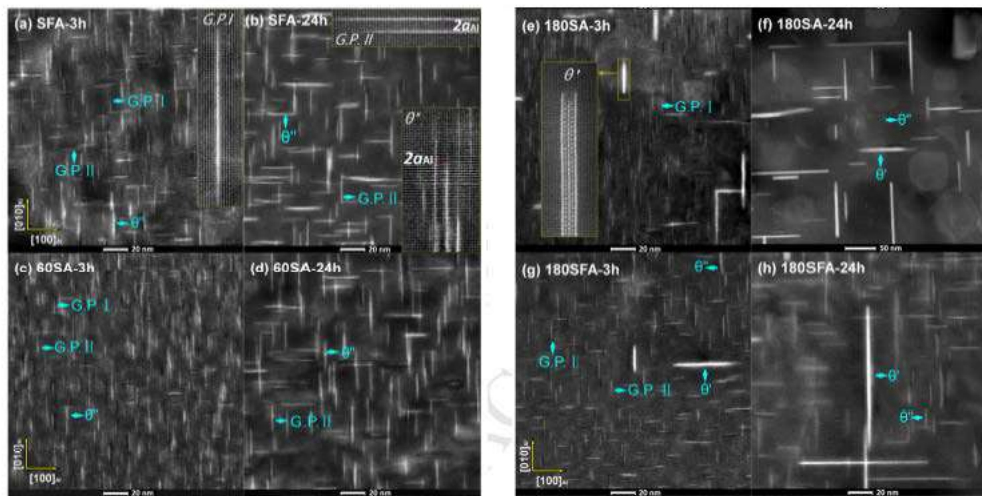


Рис. 1.11. Изображение, полученное методом просвечивающей растровой электронной микроскопии состаренных сплавов Al-Cu [63]. Выделение структурированных упрочняющих фаз в системе после старения - ГП зон, θ'' и θ' фаз.

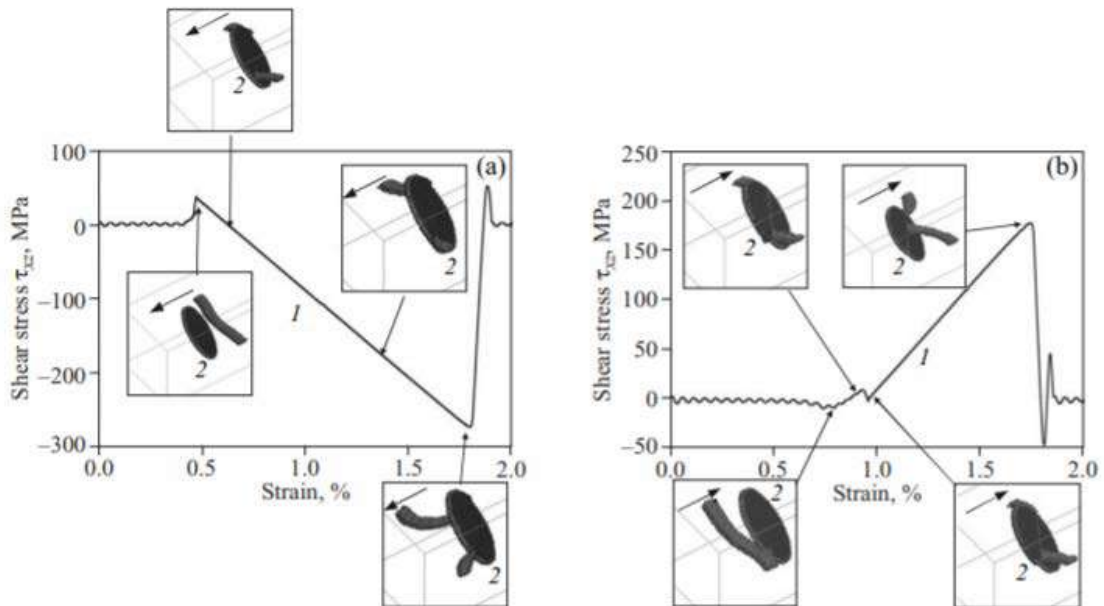


Рис. 1.12. Взаимодействия краевой дислокации и ГП I фазы и соответствующее поведение напряженного состояния системы в МД моделировании Al-Cu сплава [97].

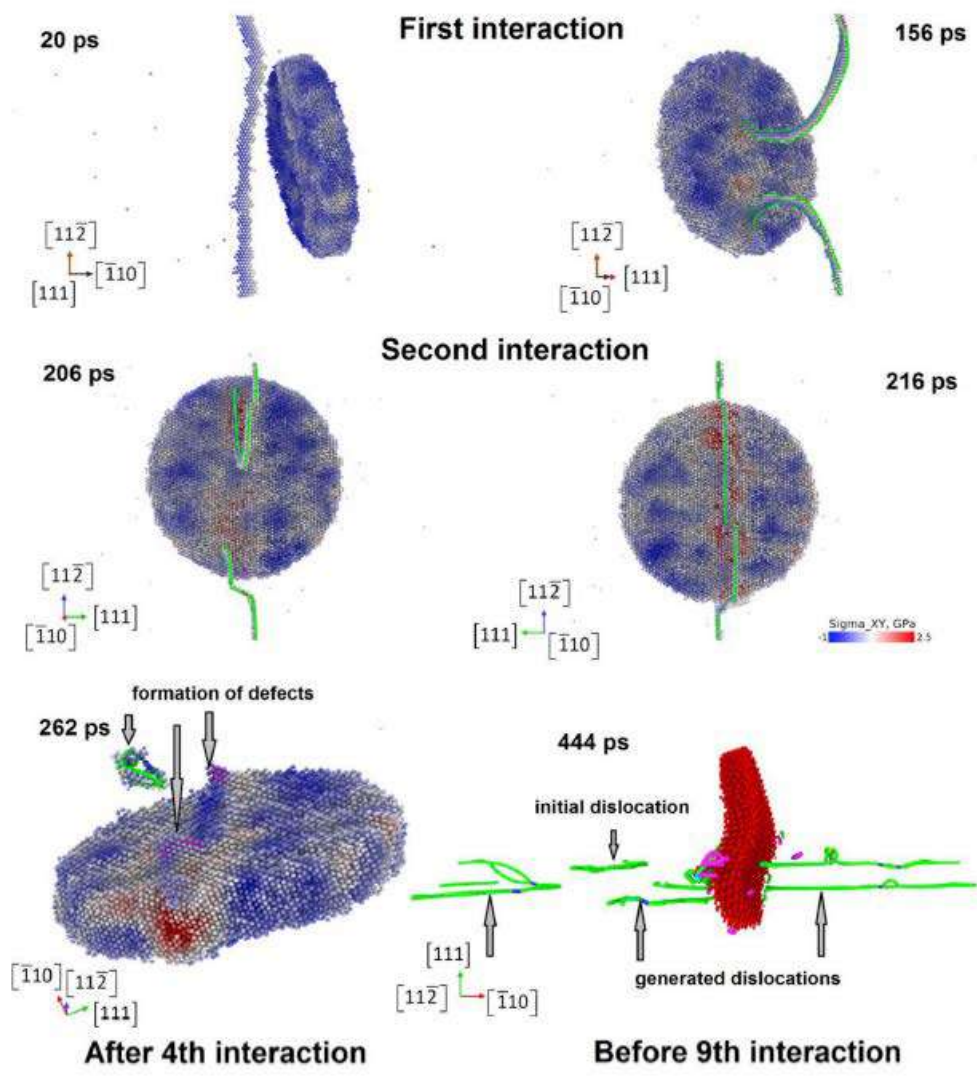


Рис. 1.13. Последовательные взаимодействия краевой дислокации и θ фазы с образованием петли Орована в МД моделировании алюминий-медного сплава [68].

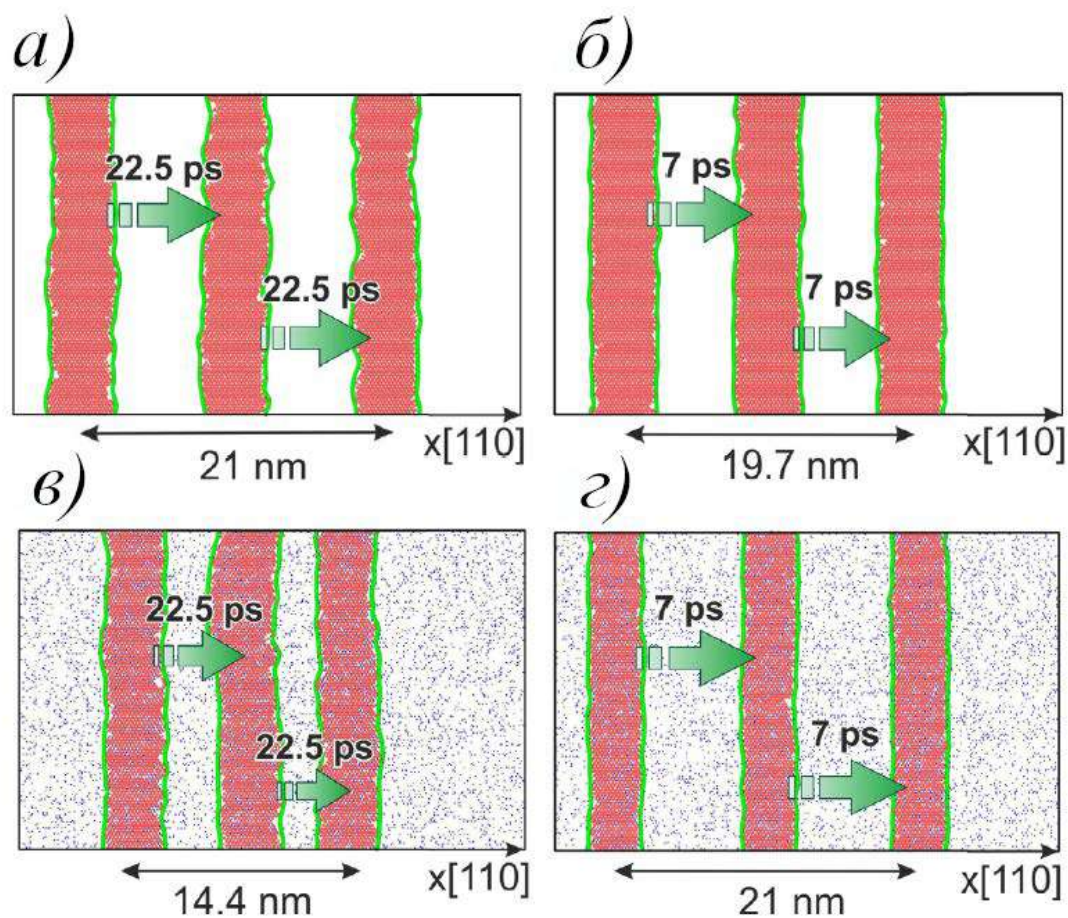


Рис. 1.14. Движение дислокаций в плоскости (111) в чистой меди (а, б) и в сплаве Cu–Ni (20 ат.% Ni) (в, г) при температуре 300 К и сдвиговом напряжении 30 МПа (а, в) и 160 МПа (б, г) [58]. Красные атомы обозначают ГПУ решетку, синие атомы – растворенные атомы Ni. Зеленые сплошные линии представляют частичную дислокацию Шокли. Движение растянутой краевой дислокации слева направо (зеленые стрелки) по направлению [110] показано на разных временных шагах.

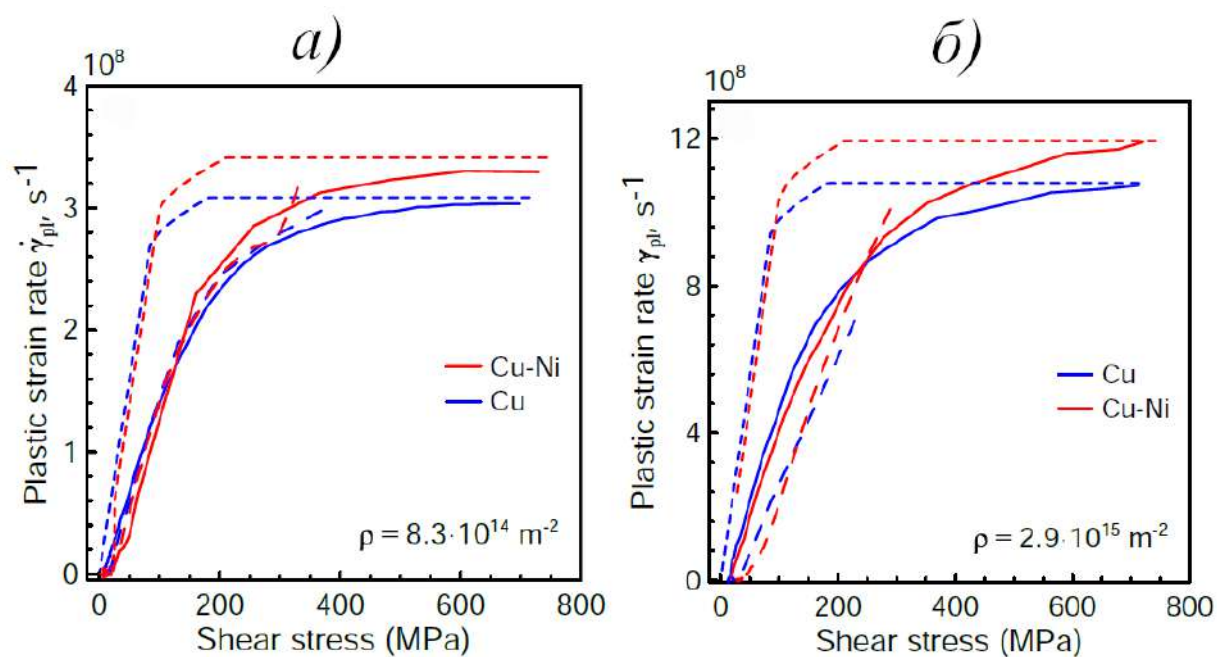


Рис 1.15. Зависимость скорости пластической деформации от напряжения сдвига для чистой меди и твердого раствора никеля 30% в медной матрице для начальной плотности дислокаций: (а) $8.3 \times 10^{14} \text{ м}^{-2}$; (б) $2.9 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$. Линии с мелкими штрихами соответствуют моделированию без междислокационных взаимодействий. Сплошные и пунктирные линии - результаты моделирования ДДД для различных начальных значений сдвиговой деформации.

1.1.4. Границы зерен

Границы зерен до сих пор остаются недостаточно изученными, несмотря на большой прогресс в исследовании внутренней структуры металлов и сплавов экспериментальными методами (рисунки 1.16, 1.18, 1.20) и при помощи атомистического моделирования (рисунок 1.17). В общем случае ГЗ можно задать, определив 5 степеней свободы: разориентацию зерен (3 степени свободы) и ориентация граничной плоскости (2 степени свободы) [42]. Этот факт сильно усложняет классификацию границ, хотя на данный момент и существует несколько устоявшихся классификаций, они недостаточны для определения полной характеристики всех границ. Первая

из них основана на решетке узлов совпадений: часть атомов на ГЗ не совпадают, тогда как другая часть создает когерентную решетку на стыке двух зерен (рисунок 1.16). В соответствии с этими несовпадениями вводится классификация границ через значение Σ , которое определяет обратную плотность точек совпадений. Альтернативная классификация строится через повторяемые структурные единицы (рисунок 1.17). Сложность такой характеристики ГЗ заключается в том, что необходимо явно выделять эти структурные единицы, которых может быть великое множество [42].

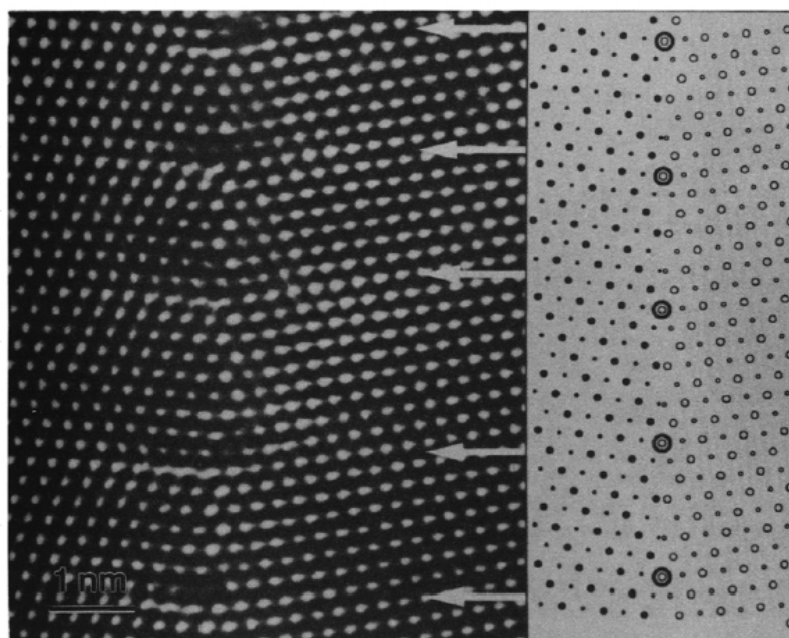


Рис. 1.16. Атомистическое представление ГЗ типа $\Sigma = 33$ в золоте [122]. Стрелки указывают на локальное несовпадение атомов на границе. Справа показаны результаты атомистической модели без релаксации с указанием точек несовпадений.

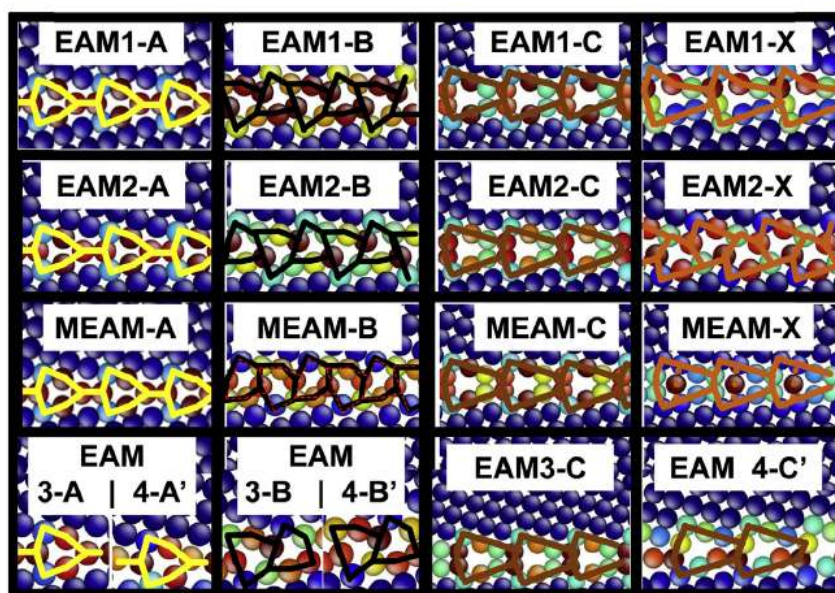


Рис. 1.17. Моделирование МД структуры ГЗ $\Sigma 5(310)$ в чистом алюминии с использованием разных межатомных потенциалов [36]. “А” – стабильная структура границы, “В”, “С” и “Х” – метастабильные структуры границы при высоких температурах. Исследование показывает, что структура и энергия ГЗ зависит от выбора межатомных потенциалов.

Прогресс экспериментальной техники позволил более детально исследовать внутреннюю структуру металлов и сплавов. Изучается распределение зерен и влияние их формы и размера на свойства материала. В работе [123] показано, что в процессе деформации алюминиевого сплава 2219, удлиненные зерна соответствуют динамическому восстановлению, тогда как равноосные зерна - динамической рекристаллизации. В Al-Mg сплаве рост зерен и выделение мультимодальной структуры зерен ведет к большей температурной стабильности [124]. Предварительная обработка интенсивной пластической деформацией Al-Cu образца позволяет добиться образования равноосных зерен с большой долей высокоугловых границ, что делает возможным режим суперпластической деформации – последующее одноосное растяжение образца составляло $\approx 1000\%$ от начального размера

[125]. Упомянутые экспериментальные исследования стимулируют развитие и апробацию теоретических моделей пластичности, которые будут более точно учитывать зёрную структуру и влияние ГЗ.

В случае сплавов, структурированные упрочняющие фазы располагаются внутри зерен (рисунок 1.19), при этом вокруг ГЗ остаются свободные от включений зоны. С другой стороны, твердый раствор внедренных атомов, которые не выделились в виде фаз в процессе обработки, скапливается около границ [124, 127]. Осаждение твердого раствора влияет на прочность сплава и может вызвать хрупкое разрушение на ГЗ [127]. Поведение ГЗ в твердом растворе является отдельной актуальной темой теоретических исследований. Атомистическое моделирование может дать большой прогресс в изучении этой проблемы, что затрагивается в 3-й главе диссертационной работы.

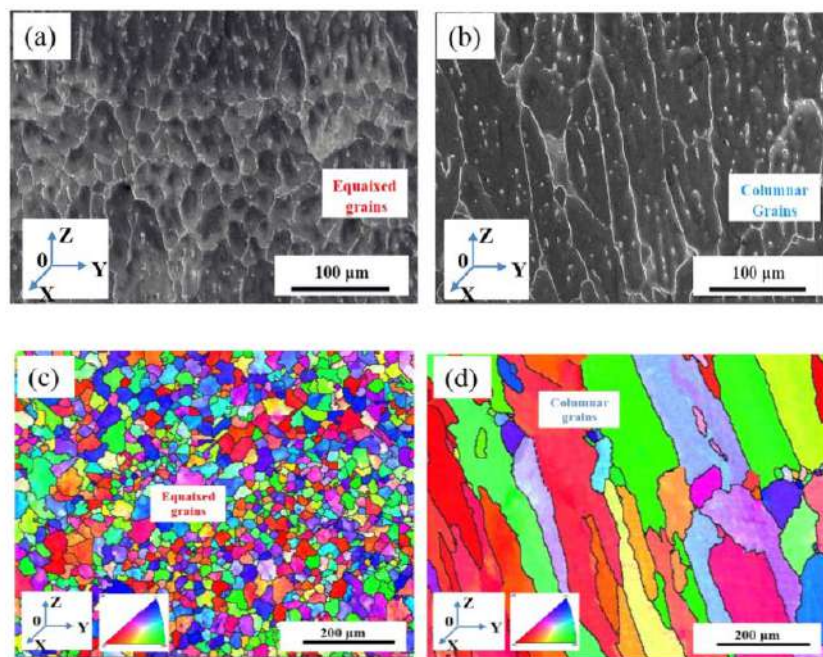


Рис. 1.18. Распределение ГЗ в поликристалле Al-Cu – сегрегация равноосных и удлиненных зерен после процедуры горячей деформации (сжатие образца при повышенных температурах) сплава 2119 в образце получено путем аддитивного производства методом дуговой сварки [123].

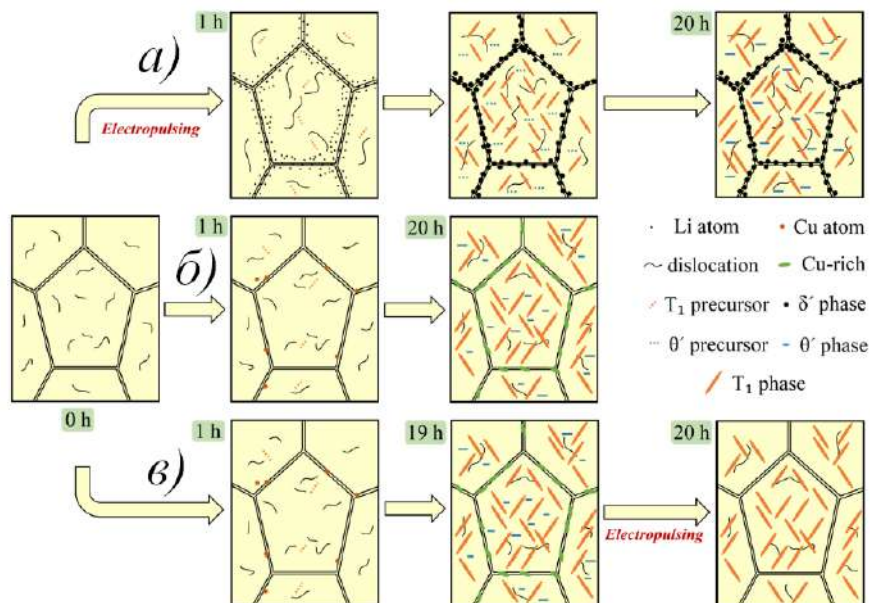


Рис. 1.19. Распределение структурированных фаз, дислокаций и твердого раствора около границ зерен в сплаве Al-Cu-Li в процессе эволюции микроструктуры состаренных образцов на различных стадиях ползучести [126]. Старение состоит из выдержки образца при температуре 160 °C и напряжении 160 МПа и применении электроимпульсного воздействия: (а) – применение электроимпульсного воздействия в начале процедуры; (б) – без применения электроимпульсного воздействия; (в) – применение электроимпульсного воздействия в конце процедуры.

После предварительной обработки образцов, распределение ГЗ по углам разориентировки (рисунок 1.20) показывает, что значительную часть всех ГЗ составляют малоугловые границы [129, 130]. Малоугловые ГЗ - низкоэнергетические дефекты и обладают повышенной подвижностью относительно других типов. Если в кристалле такие границы находятся в большом количестве, они могут влиять на физические свойства материала в процессе деформации, например, уменьшая предел текучести вследствие своей подвижности [129]. Также малоугловые ГЗ связаны с разупрочнением из-за динамического восстановления в процессе горячей деформации [123].

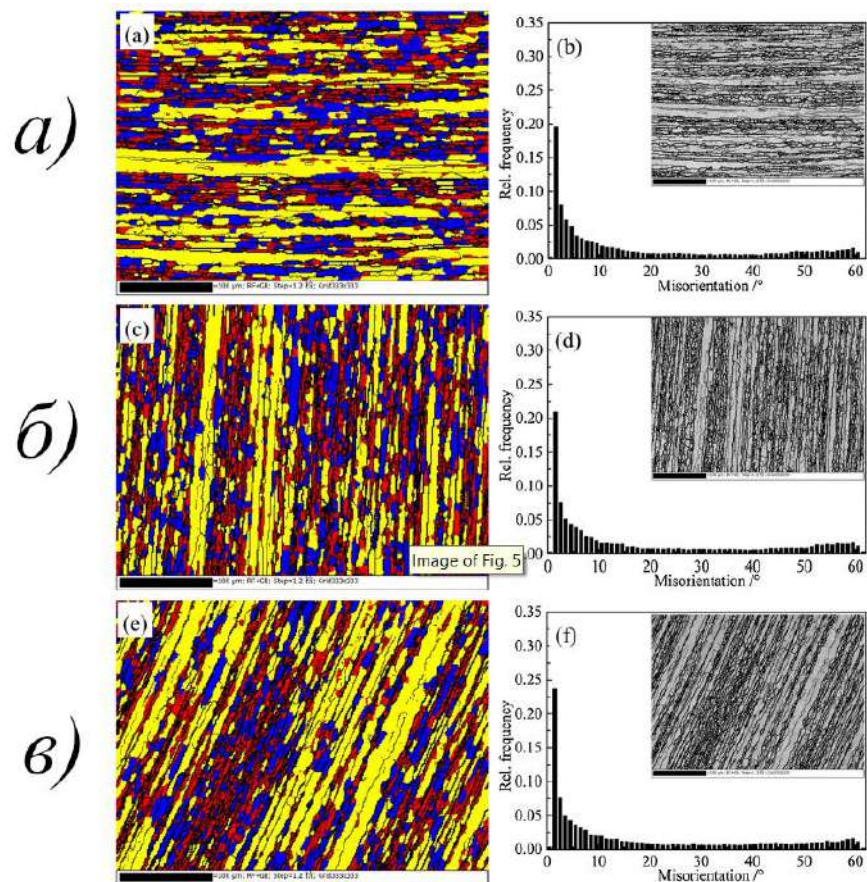


Рис. 1.20. Распределение границ зерен по углам разориентировки в сплаве Al-Zn, построенного по данным дифракции обратного рассеяния электронов [128] после процесса гомогенизации образца: (а) - выдержка при температуре 480 °С в течение 28 часов, (б) - выдержка при температуре 480 °С в течение 4 часов + при температуре 470 °С в течение 24 часов, (в) - выдержка при температуре 350 °С в течение 8 часов + при температуре 420 °С в течение 4 часов + при температуре 470 °С в течение 16 часов.

1.1.5. Малоугловые симметричные границы зерен наклона

ГЗ может состоять из когерентной решетки и мест локальных несовпадений кристаллической решетки – рисунок 1.16. В случае симметричных малоугловых ГЗ наклона, несовпадения представляют собой краевые дислокации, что показано в классической работе Рида и Шокли [29].

Краевые дислокации находятся на определенном расстоянии друг от друга в плоскости границы. С ростом угла разориентировки это расстояние уменьшается, а плотность дислокаций возрастает (рисунки 1.21, 1.22). Данная модель сформулирована в общем случае для несимметрично наклоненных зерен, поэтому на рисунке 1.21, показано, что граница содержит 2 набора дислокаций, в симметричном случае остается только один набор дислокаций в плоскости границы.

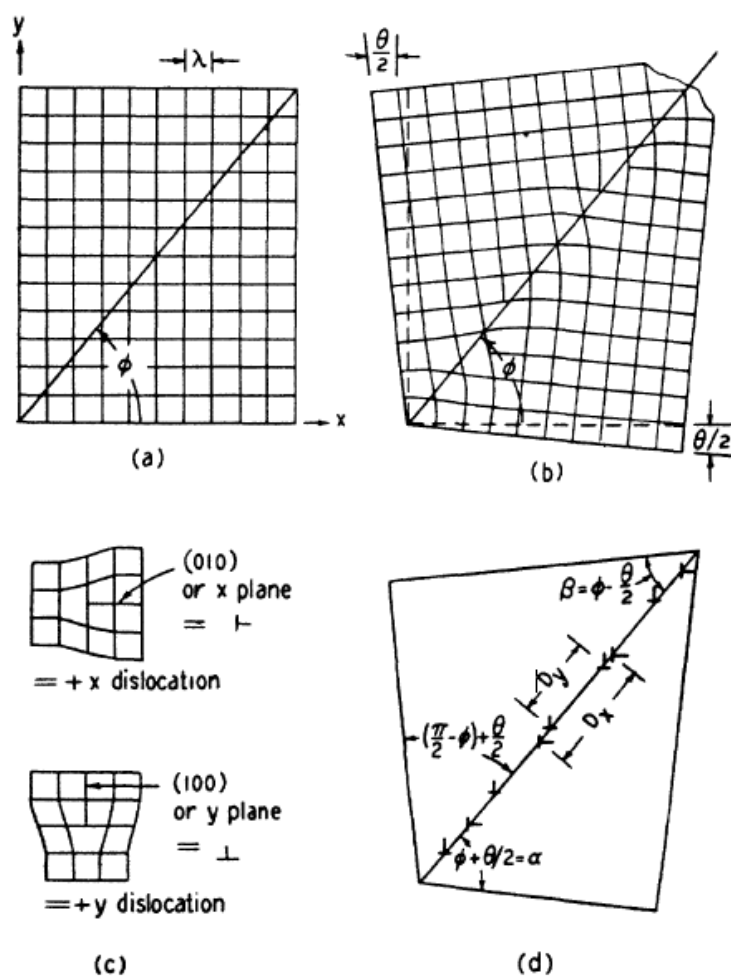


Рис. 1.21. Структура малоугловых границ зерен в модели Рида и Шокли [29]. В представленной схеме θ – угол разориентировки зерен, D_x и D_y – период на котором располагаются дислокации в плоскости ГЗ.

Авторы [34, 39] исследовали структуру низкоэнергетических границ зерен в соответствии с уравнением Франка, которое говорит о том, что зернограничные дислокации в своей совокупности не создают дальнедействующих полей напряжения в кристалле и обладают наименьшей доступной для них энергией. Это приводит к структуре малоугловых границ зерен наклона, которая согласуется с моделью Рида и Шокли – рисунок 1.22.

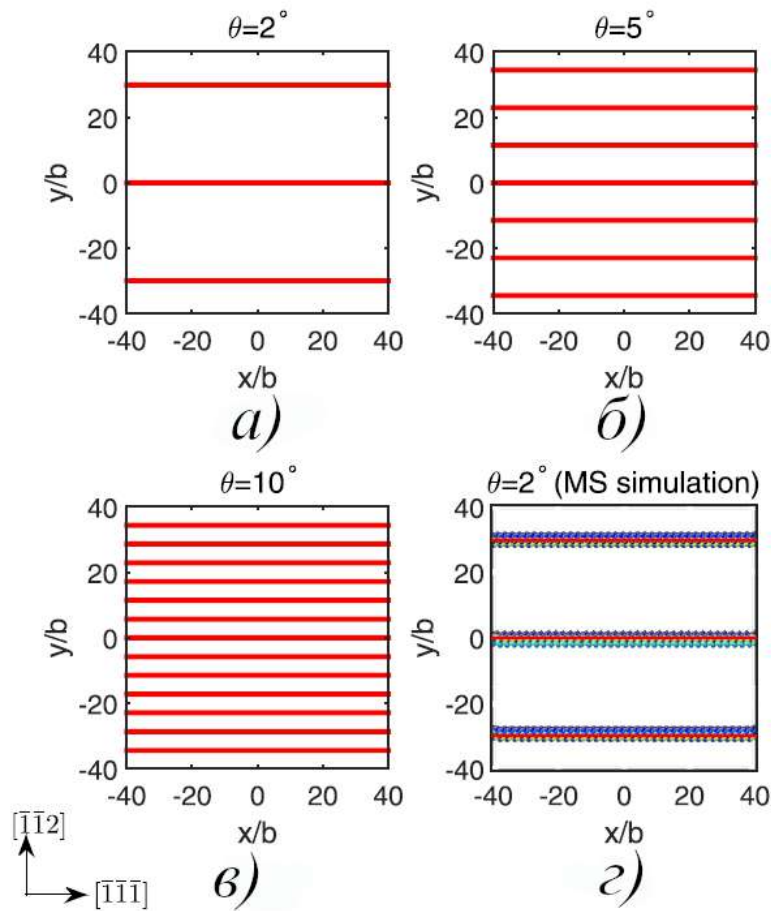


Рис. 1.22. Дислокационная структура малоугловых симметричных границ наклона (111) с различными углами разориентировки, вычисленная с использованием теоретической модели на основе уравнения Франка [39]. Рассмотренные ГЗ состоят из периодически расположенных дислокаций: (а) – угол разориентировки 2° , (б) - угол разориентировки 5° , (в) - угол разориентировки 10° , (г) – сравнение теоретической модели и результатов моделирования молекулярной статики для угла разориентировки 2° .

1.1.6. Движение границ зерен

Движение ГЗ чаще всего исследуют для 2-х основных случаев: перпендикулярно и параллельно сдвигу. В случае перпендикулярного сдвига, ГЗ мигрируют за счет зернограничного проскальзывания или движения всей границы – рисунки 1.23, 1.24. Для сдвига параллельного ГЗ рассматривают образование разъединений – то есть продольного движения части зернограничных дислокаций относительно остальной части ГЗ [31, 40, 45, 50, 71] - рисунки 1.25, 1.26.

Эксперименты показывают, что малоугловые ГЗ наклона движутся под действием сдвиговой деформации [74, 76-79]. Путем идентификации дислокаций травлением, показано, что каждая зернограничная дислокация продвигается дальше в кристалл по системам скольжения - рисунок 1.23(а, б). Численное моделирование движения симметричной малоугловой ГЗ наклона в присутствии внешних дислокаций в системе показывает, что междислокационные взаимодействия меняют форму границы [20]. С одной стороны, ГЗ движется как совокупность дислокаций под действием внешних напряжений, с другой стороны, из-за наличия внешних дислокаций форма границы изменяется, и изменение формы границы зависит от расположения внешней дислокации (рисунок 1.24).

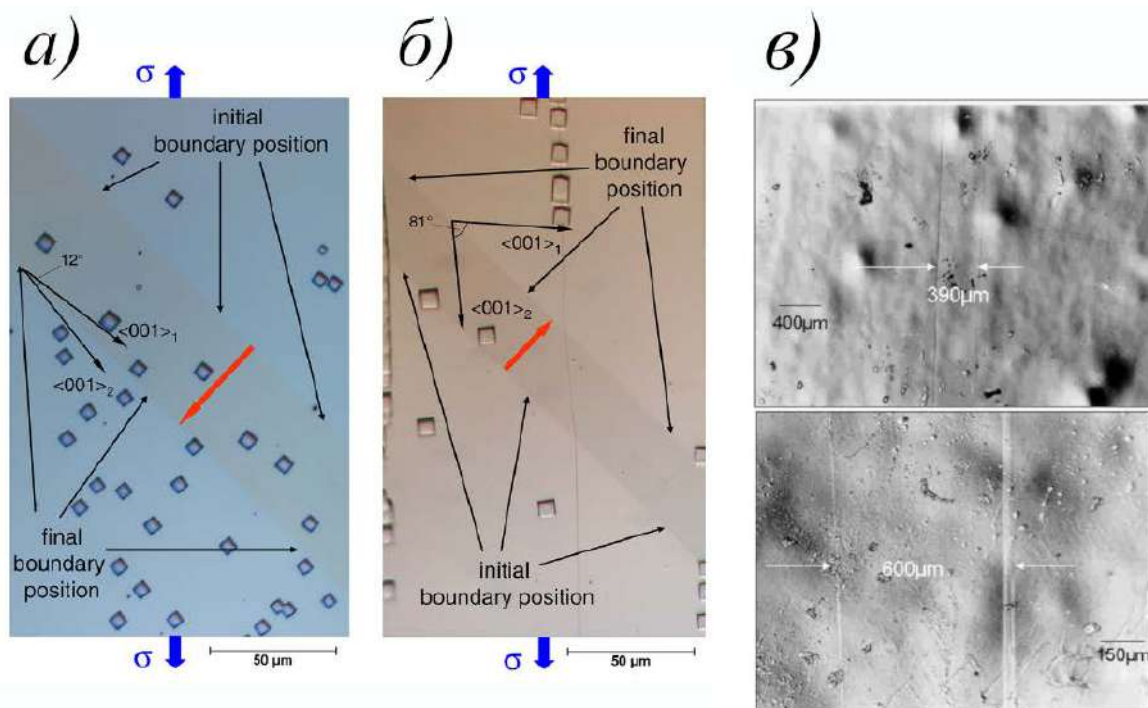


Рис. 1.23. (а) движение малоугловой ГЗ наклона с углом разориентировки 12° после 30 минут отжига при температуре 325°C и приложенном растягивающем напряжении 0.53 МПа [78]; (б) движение ГЗ наклона с углом разориентировки 81.1° после 40 минут отжига при температуре 320°C и приложенном растягивающем напряжении 0.53 МПа ; маленькие квадраты на (а) и (б) - ямки травления [78]; (в) макроскопическое свидетельство движения плоской ГЗ $\langle 111 \rangle$ с углом разориентировки 16° под действием сдвиговых напряжений перпендикулярных плоскости ГЗ [76].

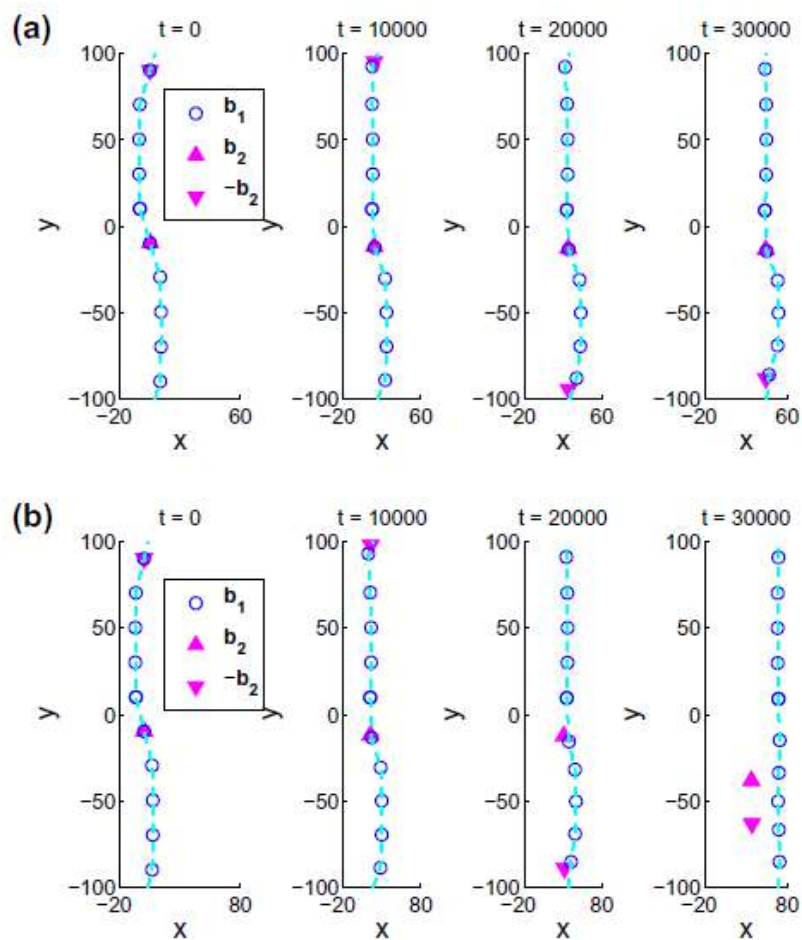


Рис. 1.24. Расположение зернограничных и внешних дислокаций, по мере того, как малоугловая ГЗ наклона перемещается вправо под действием напряжения сдвига и под влиянием внешних дислокаций [20].

Движение границ зерен, также как и движение дислокаций, сопровождается релаксацией сдвиговых напряжений в системе, что показывает МД моделирование движения ГЗ [71, 73] - рисунки 1.25(б), 1.26(а).

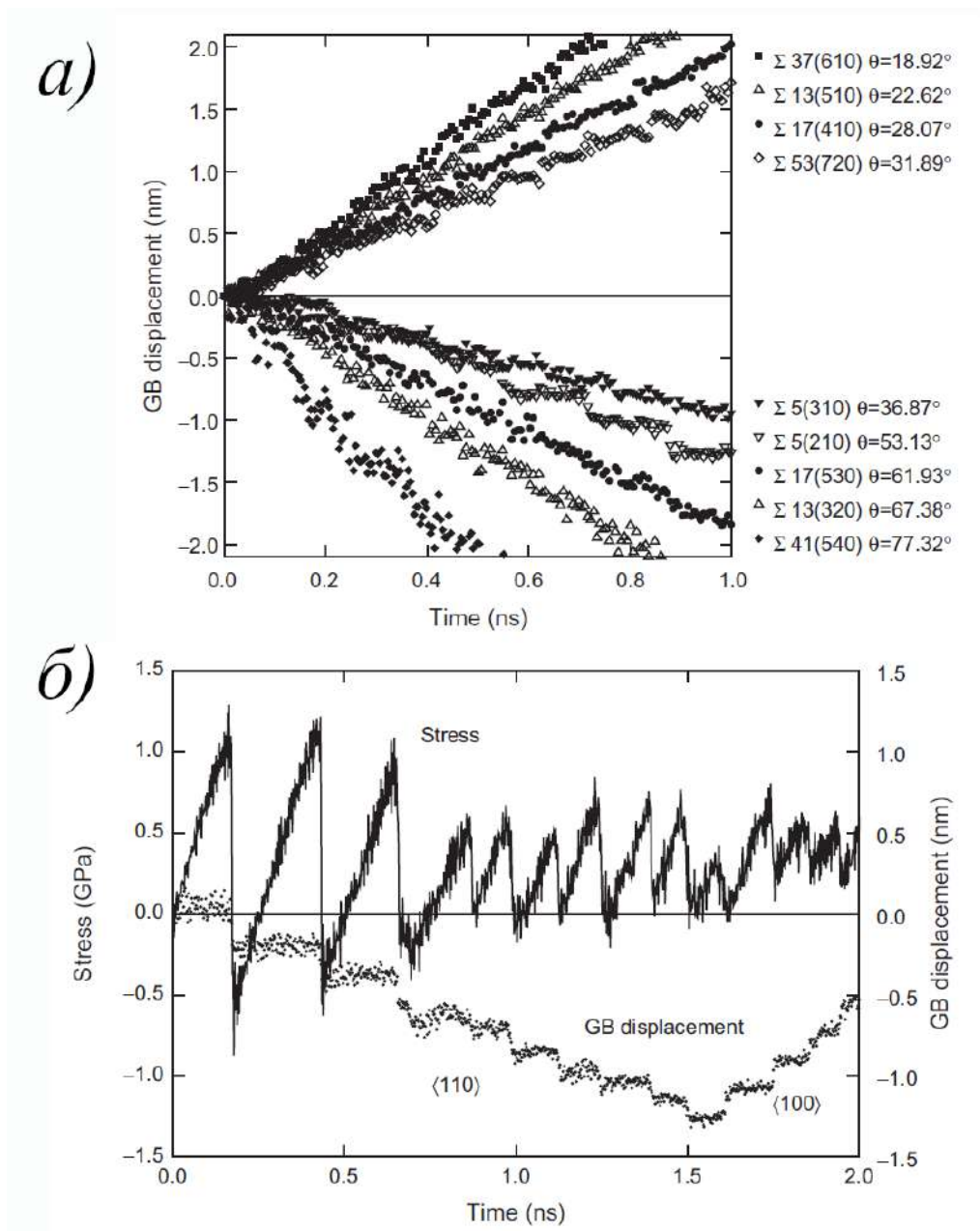


Рис. 1.25. (а) – движение ГЗ в МД моделировании при температуре 800 К под действием сдвига параллельного плоскости ГЗ, сдвиговое напряжение создается путем смещения верхнего зерна со скоростью 1 м/с [73]; (б) - сдвиговое напряжение и смещение ГЗ типа $\Sigma 53$ (угол разориентировки равен 31.9°) в процессе деформации при температуре 400 К [73].

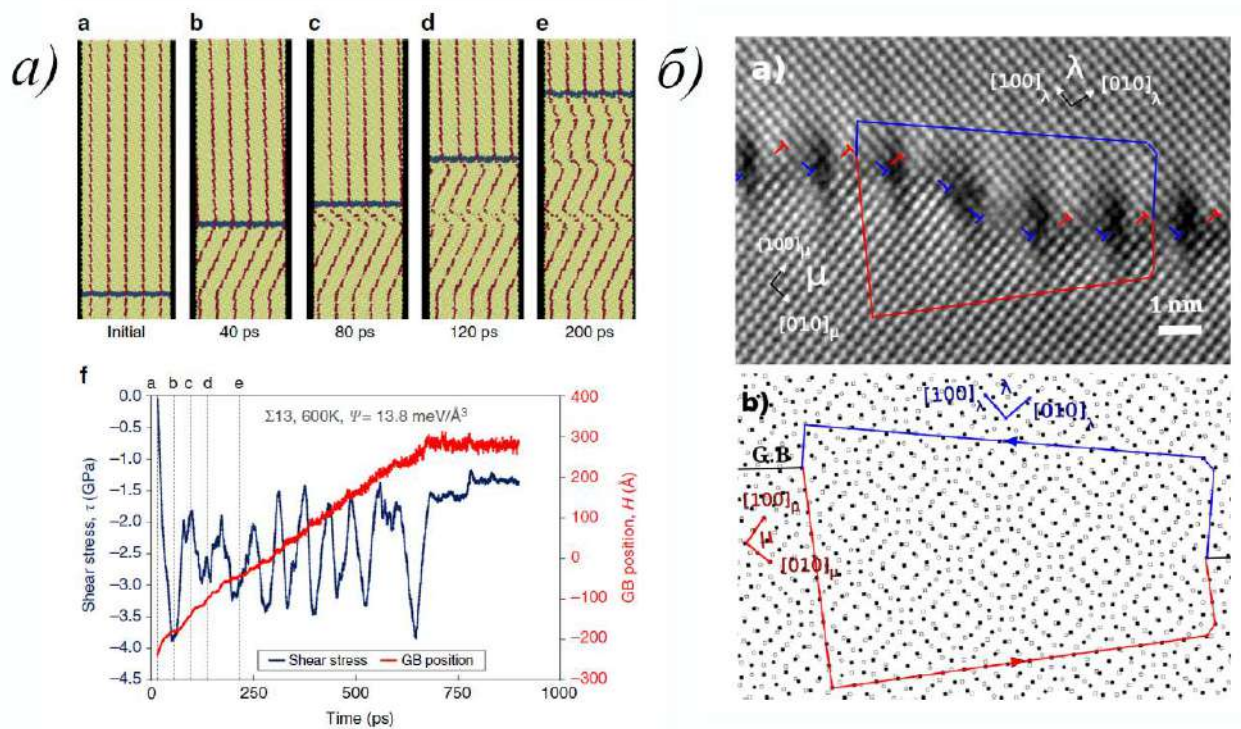


Рис. 1.26. (а) - движение симметричной ГЗ наклона типа $\Sigma 13 [111](\bar{3}41)$ при сдвиговой деформации перпендикулярной плоскости ГЗ, температура системы 600 К [71], (б) - образование разьединения на ГЗ: синие и красные линии окружают разьединение и соединяют вместе два эквивалентных узла решетки на ГЗ [88].

1.2. Исследование пластической деформации металлов в рамках механики сплошной среды

Многие крупномасштабные модели поведения вещества, в частности металлов, используют аппарат механики сплошной среды. Это сложилось как по причине более глубокого исторического развития механики, а также потому, что более точные МД расчеты требуют больших вычислительных мощностей. Одни из самых распространенным методов, использующих аппарат механики сплошной среды, которыми моделируют деформации металлических тел, являются: метод конечных элементов [1, 130], гидродинамика сглаженных частиц [131-133] и дискретная дислокационная

динамика (ДДД) [134]. Хотя в моделях конечных элементов и гидродинамики сглаженных частиц нередко используют феноменологические выражения для учета пластических деформаций, а явно полевое взаимодействие между дислокациями учитывается в ДДД или в теоретических моделях конкретного явления, тренд последних 15-20 лет на многомасштабное моделирование [3] говорит о важности точных расчетов на всех масштабных уровнях.

1.2.1. Поле напряжения винтовой дислокации

Рассмотрим цилиндр как часть сплошной среды, внутри которого среда испытала сдвиг относительно оси Z . Предположим, что в плоскости X - Y происходит скольжение дислокации (рисунок 1.27), тогда винтовую дислокацию можно описать как смещение среды на вектор Бюргерса b :

$$b = \oint \frac{\partial u}{\partial l} dl \quad (1.2)$$

где u - смещение среды, l – контур вокруг дислокации в сплошной среде.

Пусть смещение цилиндра растет пропорционально углу θ (который задает полярные координаты основания цилиндра на рисунке 1.27), тогда можно переписать смещение среды u в формуле (1.2) относительно оси Z , как функцию угла θ :

$$u = b \frac{\theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y}{x} \quad (1.3)$$

Чтобы понять, какое возмущение в среде создает винтовая дислокация, необходимо найти распределение поля напряжений в пространстве вокруг дислокации. Зная деформацию среды из уравнения (1.3) можно её выразить через тензор линейных деформаций и по обобщенному закону Гука, считая, что тело изотропное, найти тензор напряжений:

$$\begin{cases} \sigma_{xz} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}, \\ \sigma_{zy} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}, \\ \sigma_{xy} = \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 0, \end{cases} \quad (1.4)$$

где G – модуль сдвига.

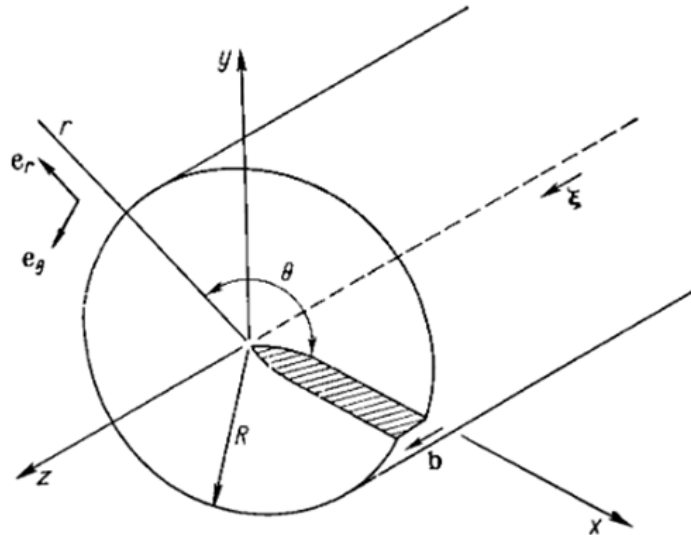


Рис. 1.27. Винтовая дислокация как смещение сплошной среды в вдоль оси Z идеальном цилиндре [2].

1.2.2. Поле напряжения краевой дислокации

Для вывода математических выражений для полей напряжения краевой дислокации рассмотрим цилиндр как часть сплошной среды, внутри которого среда испытала сдвиг, как и в случае винтовой дислокации - рисунок 1.28. Краевая дислокация производит смещение в плоскости X - Y и создает плоское напряженное состояние, которое можно определить через смещение среды как:

$$\begin{cases} u_z = 0, \\ \frac{\partial u_i}{\partial z} = 0. \end{cases} \quad (1.5)$$

Тогда уравнения равновесия сплошной среды принимают вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (1.6)$$

Решение задач, которые задаются плоским напряженным состоянием, производится обычно через функцию напряжения Эри $\varphi = \varphi(x, y)$ - перепишем систему уравнений (1.6):

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}, \\ \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}, \\ \sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y}. \end{cases} \quad (1.7)$$

С помощью условий совместности [2] и по обобщенному закону Гука и формуле (1.7) можно получить следующее дифференциальное уравнение:

$$\nabla^4 \varphi = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 \varphi = 0. \quad (1.8)$$

Решение задачи краевой дислокации удобнее искать в полярных координатах, соответственно, уравнение (1.8) принимает вид:

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right)^2 \varphi = 0 \quad (1.9)$$

Можно переходить к решению дифференциального уравнения (1.9). Для начала сделаем следующую замену $\psi = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = \nabla^2 \varphi$ и решим задачу относительно функции ψ :

$$\nabla^2 \psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \psi = 0. \quad (1.10)$$

Используя метод разделения переменных Фурье, получим решение уравнения (1.10) в виде ряда $\psi = \sum_n R_n(r) \psi_n(\theta)$, тогда:

$$\psi = (\alpha_0 + \beta_0 \ln r) + \sum_{n=1}^{\infty} (\alpha_n r^n + \beta_n \ln r^{-n}) \sin n\theta + \sum_{n=1}^{\infty} (\gamma_n r^n + \delta_n \ln r^{-n}) \cos n\theta, \quad (1.11)$$

где $\alpha_0, \beta_0, \alpha_n, \beta_n, \gamma_n, \delta_n$ – произвольные постоянные.

Для того чтобы определить явный вид постоянных в выражении (1.11), проанализируем рисунок 1.28. Ясно, что минимум функции ψ находится при значении угла $\theta = \frac{\pi}{2}$ и $\theta = -\frac{\pi}{2}$. Из литературных данных [2] известно, что при росте r значение ψ должно убывать, члены с r^{-n} при $n \geq 2$ содержат более тонкие и нелинейные эффекты, связанные с внутренней структурой дислокации, а члены r^n определяют наложение поверхностных сил извне, и в нашем случае все эти члены можно не учитывать. Тогда следующее выражение можно принять за решение уравнения (1.10):

$$\psi = \beta_1 r^{-1} \sin \theta \quad (1.12)$$

После решения уравнения (1.10) необходимо решить уравнение (1.9) и получить вид функции φ :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \varphi = \beta_1 r^{-1} \sin \theta \quad (1.13)$$

Частное решение (1.13), которым можно ограничиться на выводе напряженного состояния вокруг краевой дислокации есть:

$$\varphi = \frac{\beta_1}{2} r \sin \theta \ln r. \quad (1.14)$$

Необходимо найти константу β_1 в (1.14), для этого определим вектор Бюргерса относительно компонент тензора деформации при смещении сплошной среды краевой дислокацией:

$$b = \int_{-\infty}^{+\infty} [\varepsilon_{xx}(x, \eta) - \varepsilon_{xx}(x, -\eta)] dx; \eta \rightarrow 0. \quad (1.15)$$

где ε_{xx} – нормальная компонента тензора деформации относительно оси X.

Выразив функцию φ , через связь напряжений и функции Эри (1.7) и затем, воспользовавшись обобщенным законом Гука и применив условие (1.15) найдем необходимый вид константы β_1 :

$$\beta_1 = \frac{-Gb}{\pi(1-\nu)}. \quad (1.16)$$

где ν - коэффициент Пуассона.

Продифференцировав функцию Эри, как указано в ее определении (1.7), получим поля напряжений вокруг краевой дислокации:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{zz} = -\frac{Gb\nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y}{x^2 + y^2}, \\ \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0. \end{array} \right. \quad (1.17)$$

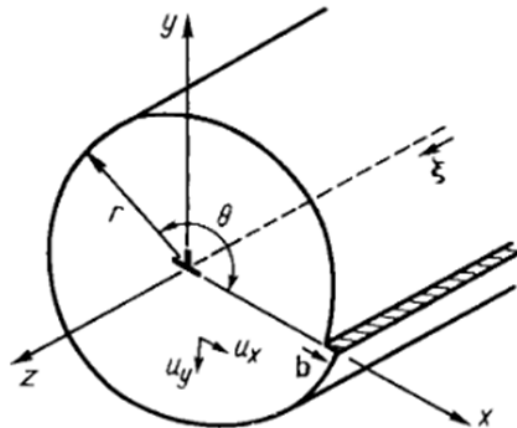


Рис. 1.28. Краевая дислокация как смещение среды вдоль оси X в идеальном цилиндре [2].

1.3. Исследование пластической деформации металлов методом молекулярной динамики

Развитие атомистических моделей поведения вещества позволило глубже понять процессы, лежащие в основе деформации металлов и сплавов, многие результаты уже были описаны в разделах 1.1.3 - 1.1.6 и во введении. За последние 20 лет появилось множество работ, в которых рассматривается структура металлов, исследуется характер и движение дефектов кристаллической структуры в процессе различных типов деформации, поведение металлов при различных температурах и другие процессы, моделирование которых на атомном уровне дает более полное понимание. На данный момент метод МД является неотъемлемой частью исследований металлов и сплавов и продолжает свое развитие. МД может описывать тонкие процессы в более масштабных моделях сплошной среды [33], к примеру, описание интерфейса между зёрнами (рисунок 1.29), где поведение самих зёрен описывается с помощью метода конечных элементов. Значительный рост вычислительных мощностей в последние десятилетия ведет к тому, что МД системы становятся больше, также как и времена моделирования [71], например, это позволяет наблюдать за эволюцией зёрновой структуры поликристалла (рисунок 1.30). Также, феноменологические уравнения состояния для достаточно сложных систем могут параметризовываться на основе данных МД моделирования [135] - рисунок 1.31.

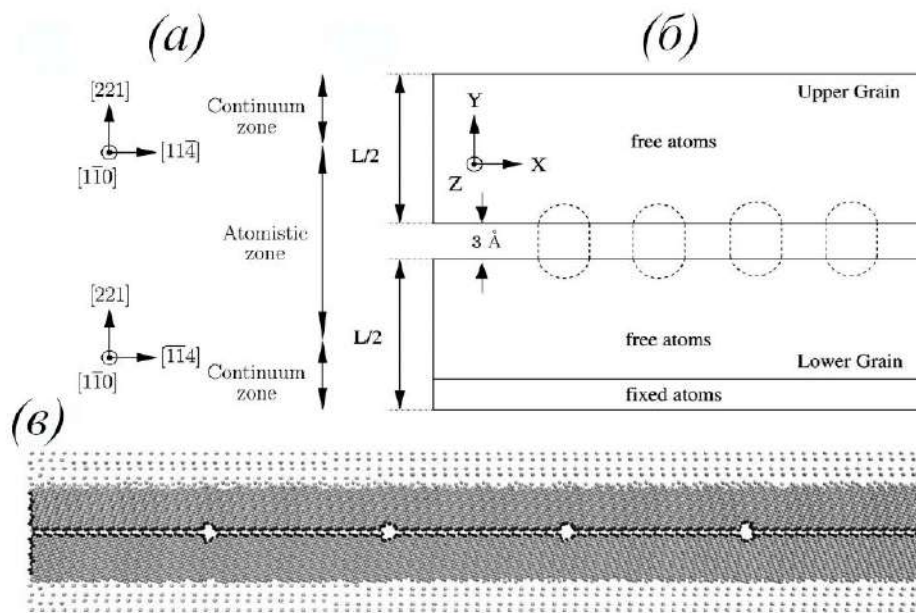


Рис. 1.29. Квазиконтинуальное моделирование бикристалла с ГЗ типа $\Sigma 9$ (221) [33]: (а) - схема моделирования с разделением на атомистическую зону (ГЗ) и зону кристалла, которая описывается в рамках механики сплошной среды; (б) – моделирование зерен бикристалла как сплошной среды; (в) – описание ГЗ с помощью атомистического моделирования.

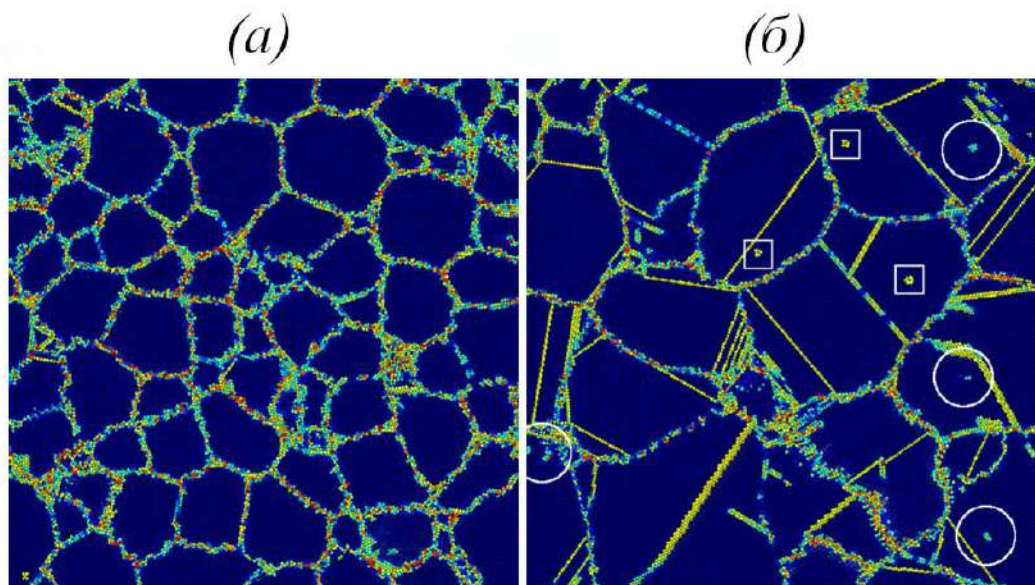


Рис. 1.30. МД моделирование отжига в поликристалле никеля при температуре 1228 °С 2.5 нс: (а) – изначальная структура кристалла; (б) - в процессе отжига происходит рост зерен и миграция ГЗ [71].

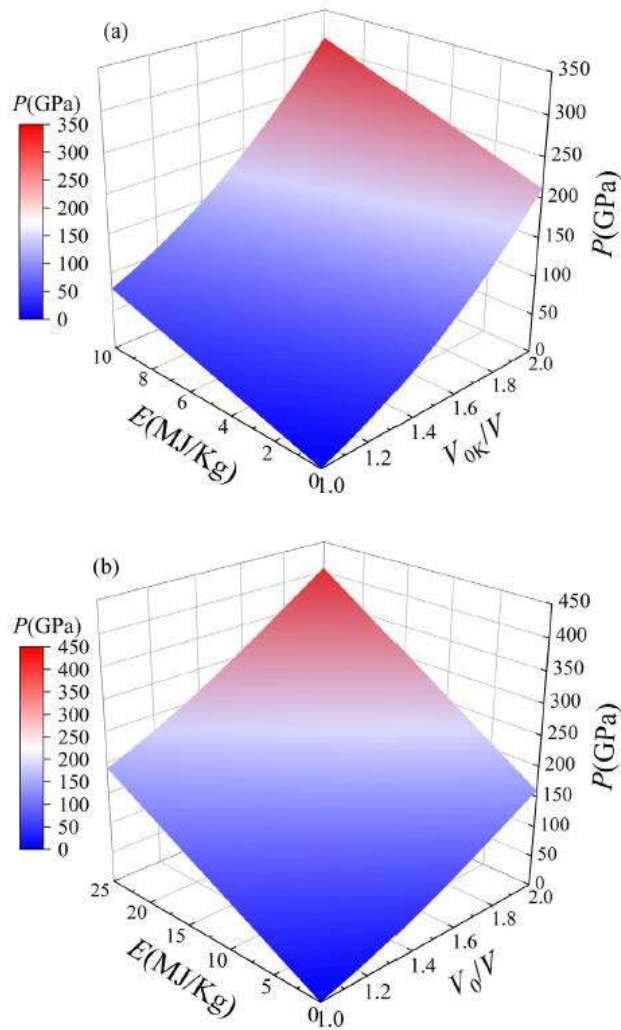


Рис. 1.31. Уравнение состояния Ti-Al сплава типа Мю-Грюнайзера в форме P - V - E , построенного на основе данных МД моделирования ударных волн в сплаве [135].

1.3.1. Уравнения движения частиц

Для консервативной системы, которая состоит из N частиц, функцию Гамильтона можно записать как:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i<j} U(\vec{r}_{ij}), \quad (1.18)$$

где p_i – импульс i -й частицы, m – масса каждой частицы, $U(\vec{r}_{ij})$ – функция, определяющая взаимодействие между частицами системы.

Взяв производные выражения (1.18) по координате и импульсу можно получить уравнения движения каждой частицы:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \quad (1.19)$$

$$m \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_j \vec{F}(\vec{r}_{ij}), \quad (1.20)$$

где \vec{r}_i – положение частицы, \vec{v}_i – скорость частицы, $\vec{F}(\vec{r}_{ij})$ – сила, действующая на каждую частицу.

Система дифференциальных уравнений (1.19) – (1.20) решается различными разностными методами, но чаще всего применяется алгоритм Верле из-за того, что он вычислительно прост, но при этом обладает достаточной точностью. Чтобы получить математический вид этого алгоритма распишем положение частицы \vec{r} в ряд Тейлора до 2-го члена:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)(\Delta t)^2}{2}, \quad (1.21)$$

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)(\Delta t)^2}{2}, \quad (1.22)$$

где Δt - шаг численного метода, \vec{a} - ускорение частицы.

Сложим выражения (1.21) – (1.22):

$$\vec{r}(t + \Delta t) \approx 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)(\Delta t)^2. \quad (1.23)$$

В форме алгоритма (1.23) необходимо знать положение на предыдущем шаге численного метода $\vec{r}(t - \Delta t)$, то есть невозможно в начале моделирования найти координату частицы, поэтому для практической реализации чаще всего используют алгоритм Верле в другой форме – скоростной:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)(\Delta t)^2}{2}, \quad (1.24)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{(\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t))\Delta t}{2}. \quad (1.25)$$

1.3.2. Граничные условия

В МД моделировании металлов и сплавов периодические граничные (рисунок 1.32) условия очень важны. Фактически, МД моделирование происходит в нанометровых масштабах, поэтому для понимания внутренних процессов деформации (например, движения дислокаций и ГЗ, чему посвящена настоящая диссертационная работа) важно изолировать моделируемую систему от граничных эффектов.

При использовании периодических граничных условий ячейка моделирования $A(\vec{r})$ повторяет себя L -е число раз:

$$A(\vec{r}) = A(\vec{r} + \vec{k}L), \vec{k} = k_1, k_2, k_3. \quad (1.26)$$

где \vec{k} – вектор трансляций.

Периодичность накладывает особые правила на вычисления энергии взаимодействия между частицами, кроме суммы $\sum_{i<j} U(\vec{r}_{ij})$ в выражении (1.18) необходимо учитывать дополнительный член, возникающий за счет взаимодействия через периодические граничные условия:

$$U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) = \sum_{i<j} U(\vec{r}_{ij}) + \sum_{\vec{k}} \sum_{i<j} U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j + \vec{k}L|). \quad (1.27)$$

Сумма (1.27) бесконечна, поэтому применяют следующее ограничение: текущая частица взаимодействует только со своими ближайшими отображениями:

$$\vec{r}_{ij} = \min_{\vec{k}} (|\vec{r}_i - \vec{r}_j + \vec{k}L|) \quad (1.28)$$

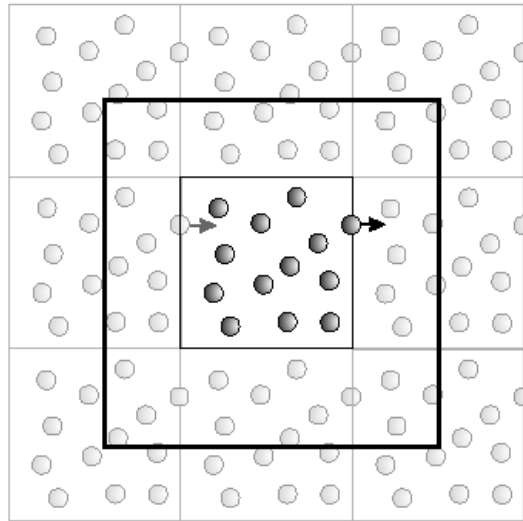


Рис. 1.32. Схема периодических граничных условий в МД моделировании: в центре – моделируемая система, ячейки вокруг – периодические копии.

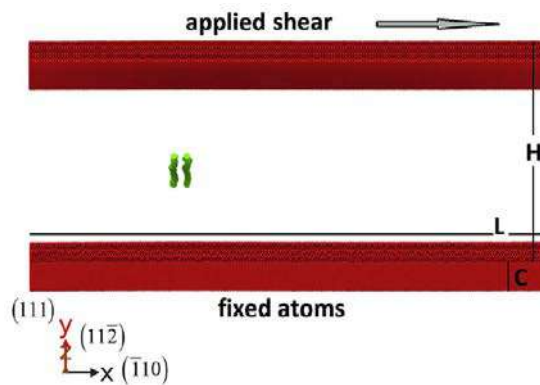


Рис. 1.33. Применение смешанных граничных условий (по оси X – периодические, по оси Y - непериодические) для моделирования сдвига в МД системе, когда верхняя часть кристалла сдвигается с равномерной скоростью [98].

Постановка непериодических граничных условий приводит к тому, что частицы не взаимодействуют друг с другом через такую границу и не перемещаются с одной стороны системы на другую. Жесткие границы могут вносить артефакты в результаты МД моделирований. Однако в большинстве случаев используется сочетание непериодических и периодических граничных условий (рисунок 1.33).

1.3.3. Измерение макропараметров молекулярно-динамической системы

Для вычисления макропараметров в методе МД используют математический аппарат статистической физики, то есть рассматривают усреднение Гиббса по статистическому ансамблю. Практически это реализуется путем M измерений системы в короткий интервал времени и усреднения рассматриваемой величины A :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i. \quad (1.29)$$

Отклонение величины A можно оценить как:

$$\sigma^2(\langle A \rangle) = \frac{1}{M} \sigma^2(A) \left[1 + 2 \sum_i \left(1 - \frac{i}{M} \right) \phi_i \right], \quad (1.30)$$

где $\phi_i = \frac{\langle A_i A_0 \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A \rangle - \langle A \rangle^2}$ – автокорреляционная функция.

Чтобы установить связь между макропараметрами системы необходимо ввести уравнение состояния. Рассмотрим уравнения движения частиц вещества (1.19) – (1.20) и выделим две силы – сила со стороны стенок \vec{F}_i и сила, возникающая вследствие взаимодействия частиц \vec{F}_{ij} и перепишем уравнение (1.20):

$$m \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + \sum_j \vec{F}_{ij}. \quad (1.31)$$

Умножим уравнение движения (1.31) на положение частиц \vec{r}_i и проинтегрируем по времени:

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N m \vec{v}_i \vec{r}_i = \sum_{i=1}^N \left(\vec{F}_i + \sum_j \vec{F}_{ij} \right) \vec{r}_i + 2 \sum_{i=1}^N m_i \frac{\vec{v}_i^2}{2}. \quad (1.32)$$

Возьмем среднее по времени от выражения (1.32) и получим связь кинетической энергии с силами \vec{F}_i и \vec{F}_{ij} :

$$2N\langle E_K \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \left(\vec{F}_i + \sum_j \vec{F}_{ij} \right) \vec{r}_i \right\rangle, \quad (1.33)$$

где $\langle E_K \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_i \frac{\bar{v}_i^2}{2} = \frac{3}{2} kT$ - средняя кинетическая энергия системы частиц.

Усредненное выражение в правой части (1.33) можно записать иначе:

$$\left\langle \sum_{i=1}^N \vec{F}_i \vec{r}_i \right\rangle = -P \int_V \text{div} \vec{r} dV = -3PV, \quad (1.34)$$

$$\sum_i \sum_j \langle \vec{r}_i \vec{F}_{ij} \rangle = \langle U \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum \langle (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \vec{F}_{ij} \rangle, \quad (1.35)$$

где P – давление и V - объем системы.

После всех преобразование (1.31) - (1.35), можно записать вириальное уравнение состояния рассматриваемого вещества:

$$P = \frac{2N\langle E_K \rangle}{3V} + \frac{\langle U \rangle}{3V}. \quad (1.36)$$

В выражении (1.36) явный вид члена $\langle U \rangle$ определяется выбором межатомного потенциала взаимодействия, для металлов обычно применяют потенциал погруженного атома, о котором более подробно рассказано в пункте 1.3.5.

1.3.4. Функции термостатирования и баростатирования

В последние 10-20 лет одни из самых часто используемых функций термостатирования и баростатирования в методе МД – Нозе-Гувера [136, 137] и Беренсдена [138]. Термостат дает возможность использовать формализм канонического ансамбля для получения макропараметров, что является необходимым для правильной интерпретации результатов МД моделирования. Через связь кинетической энергии и температуры можно получить текущую температуру в МД системе:

$$\sum_{i=1}^N \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m} = \frac{kT}{2} n_f, \quad (1.37)$$

где k – постоянная Больцмана, n_f – число степеней свободы системы.

Самый простой способ контроля температуры – явно ее масштабировать. Рассмотрим изменение текущей температуры $T(t)$ на масштабный коэффициент λ через связь задаваемой формулой (1.37):

$$\Delta T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N 2 \frac{m(\lambda \vec{v}_i)^2}{n_f k} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N 2 \frac{m \vec{v}_i^2}{n_f k}. \quad (1.38)$$

Путем сравнения выражений (1.37) и (1.38) можно найти вид масштабного коэффициент:

$$\lambda = \sqrt{\frac{T_0}{T(t)}} \quad (1.39)$$

где T_0 – температура рассматриваемого термостата.

Термостат Беренсдена также основан на явном перемасштабировании температуры, но все же отличается от выражений (1.38) - (1.39). Главное отличие – введение параметра τ_B , который определяет величину связи между термостатом и системой. Изменение температуры на шаг δt моделирования, в этом случае, можно записать как:

$$\Delta T = \frac{\delta t}{\tau_B} (T_0 - T(t)). \quad (1.40)$$

Выражение (1.40) совместно с формулой (1.39) дает масштабный коэффициент для термостата Беренсдена:

$$\lambda^2 = 1 + \frac{\delta t}{\tau_B} \left\{ \frac{T_0}{T\left(t - \frac{\delta t}{2}\right)} - 1 \right\}. \quad (1.41)$$

Хотя термостаты такого типа дают простые выражения для контроля температуры они могут дать некоторые нефизические результаты, например,

необходимые колебания температуры для канонического ансамбля здесь отсутствуют. А в случае с термостатом Беренсдена необходима тонкая настройка параметра τ_B .

Кроме контроля температуры системы, часто необходим контроль давления, например, для релаксации остаточных напряжений в кристалле. В этом случае метод Беренсдена также применим:

$$\Delta P = \frac{\delta t}{\tau_{BP}} (P_0 - P(t)), \quad (1.42)$$

где P_0 – давление баростата, τ_{BP} – параметр определяющий величину контроля давления.

Масштабный коэффициент η , который определяет изменение объема системы, для баростата Беренсдена примет вид:

$$\eta = 1 - \frac{\beta \delta t}{\tau_{BP}} (P_0 - P(t)), \quad (1.43)$$

где β - изотермическая сжимаемость.

Другой подход к созданию термостатов – контроль среднеквадратичной скорости частиц. На этом основан термостат Нозе-Гувера. Будем считать, что есть некая внешняя “виртуальная” среда, с помощью которой удастся контролировать температуру рассматриваемой системы. Введем новую переменную s в Лагранжиан системы, которая связана с масштабным временем t' “виртуальной” среды, где связь между реальным временем и масштабным определяется как:

$$dt = s(t')dt'. \quad (1.44)$$

Сформулируем новый Лагранжиан, который включает как саму систему, так и систему термостат с “массой” M_s для искусственной переменной s :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}ms^2 \sum_i \dot{\vec{r}}_i^2 - \sum_{i<j} U(\vec{r}_{ij}) + \frac{1}{2}M_s \dot{s}^2 - n_f T \log s. \quad (1.45)$$

Найдем уравнения движения новой системы (1.45) из решения уравнения Лагранжа:

$$\ddot{\vec{r}}_i = \frac{1}{m_s^2} \vec{F}_i - \frac{2\dot{s}}{s} \dot{\vec{r}}_i, \quad (1.46)$$

$$M_s \ddot{s} = m_s \sum_i \dot{\vec{r}}_i^2 - \frac{n_f T}{s}, \quad (1.47)$$

где \dot{s} и \ddot{s} – скорость и ускорение переменной s .

Зная связь текущего времени и виртуального (1.44) переведем уравнения движения (1.46) - (1.47) из t в t' :

$$\ddot{\vec{r}}_i = \frac{1}{m} \vec{F}_i - \frac{\dot{s}}{s} \dot{\vec{r}}_i, \quad (1.48)$$

$$\ddot{s} = \frac{\dot{s}^2}{s} + \frac{s(m \sum_i \dot{\vec{r}}_i^2 - n_f T)}{M_s}. \quad (1.49)$$

Уравнение (1.48) содержит член $\frac{\dot{s}}{s} \dot{\vec{r}}_i$, который отвечает за диссипацию энергии. Соответственно, с использованием уравнения (1.49), происходит вычисление переменных s и \dot{s} - то есть фактически определяется механизм диссипации энергии, благодаря чему происходит поддержание моделируемой системы в нужном температурном диапазоне.

Перейдем к баростату Нозе-Гувера. Механизм баростата аналогичен термостату Нозе-Гувера – только в этом случае масштабируется объем системы V . Перепишем Лагранжиан (1.45) с учетом новой переменной s массой M_s , характеризующей инертность изменению объема системы:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2} m V^{\frac{2}{3}} s^2 \sum_i \dot{\vec{r}}_i^2 - \sum_{i < j} U \left(V^{\frac{1}{3}} \vec{r}_{ij} \right) + \frac{1}{2} M_s \dot{s}^2 + \frac{1}{2} M_V \dot{V}^2 - n_f T \log s \\ & - PV. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Как и в предыдущем случае найдем уравнения движения системы путем решения уравнения Лагранжа (1.50) и перейдем к виртуальному времени с помощью преобразования (1.44):

$$\ddot{\vec{r}}_i = \frac{1}{mV^{\frac{1}{3}}} \vec{F}_i - \left(\frac{\dot{s}}{s} + \frac{2\dot{V}}{3V} \right) \dot{\vec{r}}_i, \quad (1.51)$$

$$\ddot{s} = \frac{\dot{s}^2}{s} + \frac{s \left(mV^{\frac{2}{3}} \sum_i \dot{\vec{r}}_i^2 - n_f T \right)}{M_s}, \quad (1.52)$$

$$\ddot{V} = \frac{\dot{s}\dot{V}}{s} + \frac{s^2 \left(mV^{\frac{2}{3}} \sum_i \dot{\vec{r}}_i^2 + V^{\frac{1}{3}} \sum_{i<j} \dot{\vec{r}}_{ij} \cdot \vec{F}_{ij} - 3PV \right)}{3M_V V}. \quad (1.53)$$

В итоге получены уравнения, которые описывают механизм диссипации энергии (1.52) и механизм изменения объема (1.53) и это учитывается в уравнении движения системы (1.51). Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} mV^{\frac{2}{3}} \sum_i \dot{\vec{r}}_i^2 + \sum_{i<j} U \left(V^{\frac{1}{3}} \vec{r}_{ij} \right) + \frac{1}{2} M_s \left(\frac{\dot{s}}{s} \right)^2 + \frac{1}{2} M_V \left(\frac{\dot{V}}{s} \right)^2 + n_f T \log s + PV. \quad (1.54)$$

1.3.5. Потенциалы межатомного взаимодействия

В настоящее время для описания межатомных взаимодействий в металлах и сплавах в основном используют потенциалы погруженного атома и модификации этого потенциала, так как они дают хорошее качественное и количественное описание процессов, возникающих в металлических телах [52, 53, A1].

Рассмотрим более подробно данный тип потенциала. Считается, что энергию взаимодействия между атомами в металлах можно разделить на две составляющие - энергию электростатического взаимодействия и энергию погружения [139]. Для получения приближенного вида потенциала взаимодействия рассмотрим сначала энергию связи атомов, выраженную через функционал плотности:

$$E = G[\rho] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{Z_i Z_j}{R_{ij}} - \sum_i \int \frac{Z_i \rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{R}_i|} d\vec{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - E_{atom}, \quad (1.55)$$

где i, j – индексы ядер, Z – заряд ядра, \vec{R} – координата ядра, $\rho(\vec{r})$ – электронная плотность твердого тела, $G[\rho]$ – кинетический, обменный и корреляционный функционал энергии, E_{atom} – энергия изолированных атомов.

Предположим справедливость нескольких гипотез:

- Пусть вид функции $G[\rho]$ из выражения (1.55) будет следующим:

$$G[\rho] = \int g(\rho(\vec{r}), \nabla \rho(\vec{r}), \nabla^2 \rho(\vec{r}), \dots) d\vec{r}, \quad (1.56)$$

где g – функция локальной электронной плотности.

- Будем считать, что электроны в металлах распределены так, что общая электронная плотность состоит из суперпозиции электронных атомных плотностей:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \rho_i^a(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad (1.57)$$

где ρ_i^a – электронная плотность i -го атома.

- Так как энергия взаимодействия разделяется на две части, определим энергию “погружения” каждого атома в электронный газ:

$$G_i(\bar{\rho}_i) = G[\rho_i^a + \bar{\rho}_i] - G[\rho_i^a] - G[\bar{\rho}_i], \quad (1.58)$$

где $\bar{\rho}$ – средняя электронная плотность электронного газа.

После принятия всех предположений, можно упростить изначальное выражение (1.55) в соответствии с (1.56) – (1.58). Первое, что нужно сделать – переписать кулоновское взаимодействие между атомами:

$$U_{ij}^a = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \frac{n_i^a(\vec{r}_1)n_j^a(\vec{r}_2)}{r_{12}}, \quad (1.59)$$

где $n_i^a(\vec{r}) = \rho_i^a(\vec{r} - \vec{R}_i) - Z\delta(\vec{r} - \vec{R}_i)$.

Получим конечное выражение для потенциала погруженного атома:

$$E = \sum_i G_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} U_{ij}^a + E_{err}, \quad (1.60)$$

где $E_{err} = G[\sum_i \rho_i^a] - \sum_i G[\rho_i^a + \bar{\rho}_i] + \sum_i G[\bar{\rho}_i]$.

В большинстве случаев принимается $E_{err} = 0$ - это дает постоянную среднюю электронную плотность на атом.

Выводы по первой главе

Пластичность металлов и сплавов в основном определяется движением дислокаций и их взаимодействием с другими дефектами кристаллической решетки - этот факт подтверждают экспериментальные данные [2, 120] и теоретические исследования [1-3]. Не смотря на множество исследований явления пластичности металлов, внутренние механизмы пластической деформации еще не до конца раскрыты. Существенный прогресс связан с многомасштабным подходом, когда явления изучаются, начиная от атомного уровня, заканчивая конструкционным, где на каждом масштабном уровне изучаются закономерности поведения системы [3, 68, 103, 105]. Исследование поведения отдельной дислокаций на атомном уровне, является актуальной задачей, так как в дальнейшем все изученные закономерности переходят на следующий масштабный уровень, что помогает решить более сложную физическую проблему.

Одним из самых распространенных дефектов кристаллической структуры, кроме дислокаций, являются границы зерен, так как в реальном мире доминирует поликристаллическое строение металлических тел. Последние исследования распределения ГЗ в кристаллах [123, 128, 129]

показывают интересные результаты: в процессе предварительной обработки и/или деформации зеренная структура может сильно меняться и влиять на протекание пластической деформации; в некоторых случаях рекристаллизация приводит к подавляющему числу малоугловых границ в кристалле. Отсюда следует вывод о важности изучения как движения ГЗ в целом, так и в частности исследования малоугловых ГЗ. В свою очередь, малоугловые ГЗ наклона обладают повышенной подвижностью относительно других типов границ, что связано с выраженной дислокационной структурой [34, 39] – это позволяет двигаться ГЗ в процессе сдвиговой деформации как совокупности дислокаций [20, 74, 76-79].

Пластической деформации сплавов препятствует наличие в них структурированных упрочняющих фаз и твердого раствора растворенных атомов [58, 63]. Дислокации и границы зерен в этом случае находятся во взаимодействии с перечисленными структурами, что увеличивает прочность материала [68, 97, 126], Хотя изучение взаимодействия дислокации и разных типов упрочняющих фаз во многом хорошо проработано, появление новых типов сплавов, например с наноразмерными кластерами [110] снова делает эту задачу актуальной для новых типов упрочняющих включений. Представляет интерес исследование движения ГЗ в твердом растворе, так как эксперименты показывают, что ГЗ в сплавах накапливают на себе растворенные атомы [124, 126].

Глава 2. Движение малоугловой границы зерна наклона (110) в ГЦК металлах

Настоящая глава диссертационной работы посвящена движению малоугловых ГЗ наклона при деформации сдвига в бикристаллах, где оба зерна состоят из одного материала (алюминия, меди и никеля), а деформация сдвига перпендикулярна плоскости границы. При нагружении реальных поликристаллов имеет место различная ориентация плоскостей ГЗ относительно направления сдвиговой деформации - поэтому исследование как параллельного, так и перпендикулярного сдвига ГЗ как частных случаев является актуальным. Движение малоугловых ГЗ как массива дислокаций под действием напряжений сдвига рассматривается в МД моделировании. Этот процесс описывается с помощью предложенной теоретической модели.

2.1. Теоретическая модель движения малоугловых границ зерен наклона

Предложенная модель движения малоугловых ГЗ учитывает распределение локальных напряжений в кристалле и их релаксацию во время движения зернограничных дислокаций - этот эффект ранее показан для уединенной краевой дислокации в работе [98]. Кроме того, в настоящей модели учитывается взаимодействие между всеми дислокациями в системе, которые составляют ГЗ [А3]. Скорость каждой зернограничной дислокации может быть вычислена с использованием уравнения движения уединенной дислокации в кристалле [98].

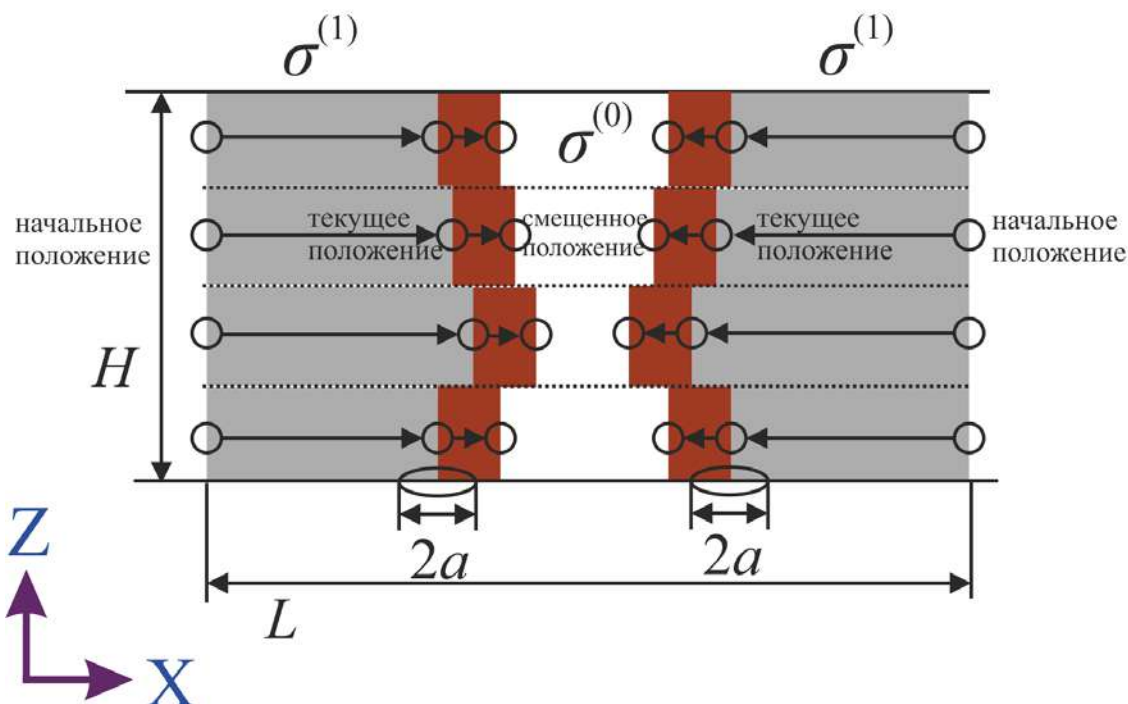


Рис. 2.1. Схема движения малоугловых ГЗ наклона под действием сдвиговых напряжений с учетом пространственного распределения локальных напряжений и пластических деформаций вокруг ГЗ. Две противоположные ГЗ с начальным расстоянием между ними равным L (общая длина системы в направлении скольжения равна $2L$), движутся навстречу друг другу. В данном случае расстоянием $2a$ обозначается область локализации напряжений вокруг ядра зернограницных дислокаций.

На рисунке 2.1 представлена схема движения ГЗ, где L - начальное расстояние между границами, тогда как общая длина системы в направлении скольжения равна $2L$. Обозначим $N/2$ количество дислокаций в каждой стенке. Общее число дислокаций в бикристаллическом образце равно N . В модели рассматриваются только зернограницные дислокации, тогда как зерна остаются бездефектными. Каждая зернограницная дислокация движется под действием как приложенных напряжений сдвига со стороны внешней сдвиговой деформации, так и под действием сил от окружающих дислокаций. Горизонтальное положение дислокаций может различаться даже

внутри одной стенки из-за кривизны ГЗ и междислокационных взаимодействий, поэтому обозначим положение каждой дислокации как x^i где $i = 1 \dots N$. Для удобства левую стенку и правую стенку явно обозначаем индексами l и r , соответственно. Левая стенка состоит из дислокаций с положением x_l^i , в то время как правая стенка состоит из дислокаций с координатами $x_r^{i+N/2}$, где $i = 1 \dots N/2$. В модели дислокации движутся строго внутри систем скольжения (рисунок 2.1), что соответствует результатам МД моделирования.

Движение дислокации приводит к перестроению кристаллической решетки за следом её движения, что приводит к релаксации локального сдвигового напряжения [98]. В кристалле возникают области с разными значениями локального сдвигового напряжения – их распределение схематично показано на рисунке 2.1. Участок, пройденный зернограничными дислокациями, является пластически деформированной областью (боковые области на рисунке 2.1). Участок перед фронтом дислокаций является пластически недеформированной областью (центральная область на рисунке 2.1). Напряжение в пластически недеформированной зоне $\sigma_{xz}^{(0)}$ является следствием внешней сдвиговой деформации и может быть определено по смещению верхней части кристалла относительно нижней с постоянной скоростью u за время t :

$$\sigma_{xz}^{(0)} = G \frac{ut}{H}, \quad (2.1)$$

где H - высота кристалла, G - модуль сдвига.

Пластически деформируемая зона находится за стенкой дислокаций, и характеризуется значением локальных напряжений $\sigma_{xz}^{(1)}$ из-за пластической релаксации сдвиговых напряжений позади движущихся дислокаций.

Величина пластической деформации может быть найдена из уравнения Орована [140]:

$$w_{xz} = \frac{bN}{4H'} \quad (2.2)$$

где b - вектор Бюргера зернограничных дислокаций, которые являются полными краевыми дислокациями.

Предполагается, что в формуле (2.2) каждая дислокация производит пластическую деформацию с необратимым сдвигом на значение b внутри соответствующего слоя разделенного по высоте кристалла. Можно получить выражение для $\sigma_{xz}^{(1)}$ через $\sigma_{xz}^{(0)}$, используя обобщенный закон Гука для отношения между деформацией и напряжением совместно с формулами (2.1) и (2.2),

$$\sigma_{xz}^{(1)} = \sigma_{xz}^{(0)} - 2Gw_{xz} = G \frac{ut - bN/2}{H}. \quad (2.3)$$

Начальные и текущие позиции дислокационных стенок определяют границу пластически деформированной области кристалла. Эти границы могут иметь изогнутую форму. Разделим образец на $N/2$ слоя длиной $2L$ и высотой $H/(N/2)$ вокруг плоскости скольжения каждой зернограничной дислокации и предположим, что текущая граница пластически деформированной области в пределах рассматриваемого слоя является вертикальной линией, совпадающей с позицией дислокаций x_l^i (или $x_r^{i+N/2}$). Изогнутый интерфейс аппроксимируется кусочно-линейной границей, как показано на рисунке 2.1. Поскольку более высокое напряжение $\sigma_{xz}^{(0)}$ действует в недеформированной области, а более низкое напряжение $\sigma_{xz}^{(1)}$ действует в пластически деформированной зоне, среднее по области напряжение можно рассчитать следующим образом:

$$\langle \sigma_{xz} \rangle = \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{Gb}{2HL} \sum_{i=1}^{N/2} (L - x_r^{i+N/2} + x_l^i). \quad (2.4)$$

В формуле (2.4) учитывается, что начальное положение левой ГЗ равно $x_l^i(t=0) = 0$, а начальное положение правой ГЗ $x_r^{i+N/2}(t=0) = L$. Уравнение (2.4) действительно до сближения противоположных ГЗ.

Выражения для сил, действующих на каждую стенку дислокации, можно получить из уравнения (2.3) по аналогии с работой, посвященной движению свободной краевой дислокации в ГЦК монокристалле [98]. Эти силы выражаются через сдвиговые напряжения, действующие на дислокацию в слое $2a$ вокруг ядра каждой дислокации внутри ГЗ, где a - характерный размер области локализации поля упругих смещений вокруг дислокационного ядра. Когда граница начинает двигаться и движение каждой зернограничной дислокаций удовлетворяет условию $x_l^i \leq a$ для левой стенки или $L - x_r^{i+N/2} \leq a$ для правой стенки (обозначим, как I этап движения), дислокации оставляют позади себя пластически деформированную область длиной x_l^i или $L - x_r^{i+N/2}$ с ослабленными сдвиговыми напряжениями $\sigma_{xz}^{(1)}$, в то время как неотрелаксированные напряжения $\sigma_{xz}^{(0)}$ действуют на область перед дислокацией с длиной $a - x_l^i$ и $a - (L - x_r^{i+N/2})$ для каждой системы скольжения. На следующем (II) этапе движение ГЗ (условия для которого: $x_r^{i+N/2} - a \geq x_l^i > a$ для левой стенки и $x_l^i + a \leq x_r^{i+N/2} < L - a$ для правой стенки) напряжение $\sigma_{xz}^{(1)}$ действует в одной половине слоя $2a$, и $\sigma_{xz}^{(0)}$ в другой половине. В процессе деформации, расстояние между дислокациями противоположных ГЗ уменьшается. Когда левая зернограничная дислокация с окружающим её слоем длиной $2a$ входит в участок $2a$ правой зернограничной дислокации ($x_r^{i+N/2} - x_l^i \leq a$, обозначим как этап III), область кристалла дополнительно релаксируется

противоположной краевой дислокацией, входящей в область усреднения рассматриваемой дислокаций. Можно описать силу и напряжение, действующие на каждую зернограничную дислокацию, на основе вышеприведенной схемы следующим образом:

$$F_{sh}^i = b < \sigma_{xz}^i >_{2a}, i = 1 \dots N \quad (2.5)$$

для левой стенки:

$$< \sigma_{xz}^i >_{2a} = \begin{cases} \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{H} \frac{x_l^i}{4a}, x_l^i \leq a \text{ (этап I);} \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{4H}, x_r^{i+N/2} - a \geq x_l^i > a \text{ (этап II);} \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{2H} \left(1 - \frac{x_r^{i+N/2} - x_l^i}{2a} \right), x_l^i + a > x_r^{i+N/2} \text{ (этап III);} \end{cases} \quad (2.6)$$

для правой стенки:

$$< \sigma_{xz}^{i+N/2} >_{2a} = \begin{cases} \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{H} \frac{(L - x_r^{i+N/2})}{4a}, L - x_r^{i+N/2} \leq a \text{ (этап I);} \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{4H}, x_l^i + a \leq x_r^{i+N/2} < L - a \text{ (этап II);} \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{2H} \left(1 - \frac{x_r^{i+N/2} - x_l^i}{2a} \right), x_r^{i+N/2} - a < x_l^i \text{ (этап III);} \end{cases} \quad (2.7)$$

где $i = 1 \dots N/2$ в обоих уравнениях (2.6) и (2.7).

В силу F_{sh}^i в уравнении (2.5) входит приложенное внешнее напряжение сдвига с учетом пластической релаксации в следах зернограничных дислокаций. В системе с множеством дислокаций кроме вклада сдвиговых напряжений, также необходимо учитывать поля напряжений от других зернограничных дислокаций. Адекватный способ учесть эти дислокационные возмущения – рассчитать силы взаимодействия между дислокациями и добавить их к силе F_{sh}^i , возникающей со стороны сдвиговой деформации.

Обозначим F_D^{ij} , как силу, действующую на i -ю дислокацию со стороны j -й дислокации. Эта сила определяется выражением, полученным в работе [114]:

$$F_D^{ij} = b_i b_j \frac{G}{2\pi(1-\mu)} \frac{\Delta x_{ij}(\Delta x_{ij}^2 - \Delta y_{ij}^2)}{(\Delta x_{ij}^2 + \Delta y_{ij}^2)^2}, \quad (2.8)$$

где $(\Delta x_{ij}, \Delta y_{ij})$ это двумерный вектор, проведенный из j -й дислокации к i -й; μ - коэффициент Пуассона.

Для того чтобы получить силу F_D^i , действующую на i -ю дислокацию, нужно формально суммировать все взаимодействия рассматриваемой дислокации:

$$F_D^i = \sum_{j \neq i} F_D^{ij}. \quad (2.9)$$

Из-за периодических граничных условий вдоль оси X , имеется бесконечный периодически повторяющийся набор стенок взаимодействующих дислокаций, и сумма в уравнении (2.9) является бесконечной. Сила взаимодействия в уравнении (2.8) уменьшается обратно пропорционально расстоянию между дислокациями. Поэтому явно в уравнении (2.9) учитывается только дислокации одной и той же ГЗ и двух соседних ГЗ: одна – противоположная граница рассматриваемой системы, а другая – периодическая копия первой границы. Взаимодействие с остальными ГЗ учитывается косвенно в уравнении (2.13). Суммарная сила, действующая на i -ю дислокацию, выглядит следующим образом:

$$F_f^i = F_{sh}^i + F_D^i. \quad (2.10)$$

Скорость каждой дислокации в стенках может быть получена путем решения дифференциального уравнения, которое было успешно использовано в работе [141] для моделирования процессов пластичности в ударных волнах и апробировано в работах [98, 142] по данным МД

моделирования для случая движения уединенной краевой и винтовой дислокации в кристаллах алюминия, магния и меди:

$$\frac{m_0}{\left(1 - \left(\frac{V_i}{c}\right)^2\right)^{3/2}} \frac{dV_i}{dt} = \left(F_f^i - \frac{bY}{2} \text{sign}(F_f^i)\right) H\left(|F_f^i| - \frac{bY}{2}\right) - \frac{B}{\left(1 - \left(\frac{V_i}{c}\right)^2\right)^{3/2}} V_i, \quad (2.11)$$

где $H(f)$ - ступенчатая функция Хэвисайда от аргумента f , m_0 - масса покоя дислокации на единицу длины, V_i - скорость i -й дислокации, Y - предел текучести, B - коэффициент трения при низкой скорости дислокации, и c - поперечная скорость звука.

На практике инертностью дислокаций, которая выражается левой частью уравнения (2.11) можно пренебречь и следующее аналитическое решение может быть получено [98] при обнулении правой части уравнения (2.11):

$$V_i = \frac{c\zeta_i}{6\sqrt{6}} \left(\frac{\left(108|\zeta_i| + 12\sqrt{3}\sqrt{4 + 27\zeta_i^2}\right)^{2/3} - 12}{|\zeta_i| \left(108|\zeta_i| + 12\sqrt{3}\sqrt{4 + 27\zeta_i^2}\right)^{1/3}} \right)^{3/2}, \quad (2.12)$$

где $\zeta_i = (cB)^{-1} [F_f^i - (bY/2)\text{sign}(F_f^i)] H(|F_f^i| - bY/2)$.

Использование аналитической формулы (2.12), вместо дифференциального уравнения по времени (2.11) предпочтительнее для расчета динамики ГЗ на больших временах при умеренных скоростях деформации.

Согласно формуле (2.11), если сила, действующая на дислокацию, превышает пороговое значение $bY/2$, то дислокация начинает движение и

второй член в правой части уравнения (2.11) замедляет скорость движения дислокации. Предел текучести зависит от плотности дислокаций согласно уравнению Тейлора [143] и имеет следующий вид:

$$Y = Y_0 + AGb\sqrt{\rho_D}, \quad (2.13)$$

где Y_0 - сопротивление от точечных препятствий и барьера Пайерлса, ρ_D - общая скалярная плотность дислокаций, A - постоянная средней силы взаимодействия на больших расстояниях по всем дислокациям.

Параметры представленной модели собраны в таблицах 2.1 – 2.2. В таблице 2.3 показано количество дислокаций в рассматриваемой системе. Часть параметров модели (b , G и c) получены непосредственно из результатов МД моделирования, в то время как остальные параметры выбраны так, чтобы обеспечить лучшее соответствие с данными МД моделирования для положения ГЗ и среднего напряжения в системе.

Таблица 2.1. Параметры теоретической модели в зависимости от рассматриваемого металла (алюминий, медь и никель).

Металл	b (м)	G (Па)	A	Y_0 (Па)	c (м/с)
Al [малый/удлинённый]	$2.87 \cdot 10^{-10}$	$28 \cdot 10^9 / 30 \cdot 10^9$	0.5/0.6	$22 \cdot 10^6$	3170
Cu	$2.56 \cdot 10^{-10}$	$55 \cdot 10^9$	0.15	$30 \cdot 10^6$	2100
Ni	$2.5 \cdot 10^{-10}$	$88 \cdot 10^9$	0.6	$12 \cdot 10^6$	2960

Таблица 2.2. Параметры теоретической модели, одинаковые для всех рассматриваемых металлов.

Параметры	Значение
B_0 (Па·с)	$3.5 \cdot 10^{-4}$
m_0 (кг/м)	$1.1 \cdot 10^{-16}$
a/b	10

Таблица 2.3. Число дислокаций внутри ГЗ и плотность дислокаций в бикристаллах как параметры теоретической модели.

Тип кристалла	ρ_D ($1/m^2$)	N
Al (2°)	$1.21 \cdot 10^{16}$	4
Al (4.5°)	$2.4 \cdot 10^{16}$	8
Al[удлинённый] (6°)	$2.1 \cdot 10^{15}$	4
Al (8.1°)	$3.62 \cdot 10^{16}$	12
Al[удлинённый] (12°)	$3.3 \cdot 10^{15}$	12
Al (12°)	$5.34 \cdot 10^{16}$	20
Cu (9°)	$4.55 \cdot 10^{16}$	18
Ni (3.6°)	$1.94 \cdot 10^{16}$	6
Ni (7.2°)	$2.39 \cdot 10^{16}$	12

2.2. Постановка задачи молекулярно-динамического моделирования движения малоугловых границ зерен наклона

Для исследования движения границ в МД моделировании рассматриваются бикристаллы – поликристаллы с 2 зернами и 2 малоугловыми ГЗ наклона. Исследуются бикристаллы ГЦК алюминия, никеля и меди. Также, численные модели данных кристаллов можно разделить на два типа: малые бикристаллы - в дальнейшем просто «бикристаллы» [рисунок 2.2(а)] и большие бикристаллы, - далее «удлинённые бикристаллы» [рисунок 2.2(б)], которые рассматривались

только для случая алюминия. Эти типы кристаллов имеют различную длину: $23 \times 23 \times 16 \text{ нм}^3$, $20 \times 20 \times 16 \text{ нм}^3$ и $22 \times 22 \times 16 \text{ нм}^3$ для алюминиевых, медных и никелевых бикристаллов, соответственно, в сравнении с $200 \times 23 \times 20 \text{ нм}^3$ для удлиненных алюминиевых бикристаллов; и разные ориентации зерен, что схематично показано на рисунке 2.2. Движение ГЗ в удлиненном бикристалле происходит по направлению к центральному зерну с ориентацией решетки $[110]$, параллельной направлению сдвига, что позволяет рассматривать движение границы на большем расстоянии, чем в случае малых бикристаллов. Все численные модели кристаллов построены с использованием программного пакета ATOMSK [116]: сначала задается монокристалл с осями X , Y и Z в лабораторной системе координат, ориентированными вдоль кристаллографических направлений $[110]$, $[\bar{1}10]$ и $[001]$, затем в нем выбираются 2 точки с координатами $(X_m/4, Y_m/2, Z_m/2)$ и $(3X_m/4, Y_m/2, Z_m/2)$, где X_m , Y_m , Z_m – размеры кристалла по соответствующим осям. Далее по этим точкам строится трехмерный граф Вороного. После этого зоны Вороного, которые и являются фактически зернами бикристалла, вращаются симметрично относительно оси $Y = [\bar{1}10]$ и получается симметричная ГЗ наклона: одна граница показана в середине на рисунке 2.2(а), в то время как другая граница на краю кристалла возникает из-за периодических граничных условий по оси X . Создание удлиненного бикристалла аналогично предыдущему случаю – изначально определяются точки графа Вороного: $(X_m/4, Y_m/2, Z_m/4)$, $(3X_m/4, Y_m/2, 3Z_m/4)$. После создания симметричной ГЗ наклона в данном бикристалле, используется преобразование координат X - Z для вращения кристалла - среднее зерно с ориентацией кристаллографических осей $[110]$, $[\bar{1}10]$ и $[001]$ совмещается с осями лабораторной системы координат, как показано на рисунке 2.2(б).

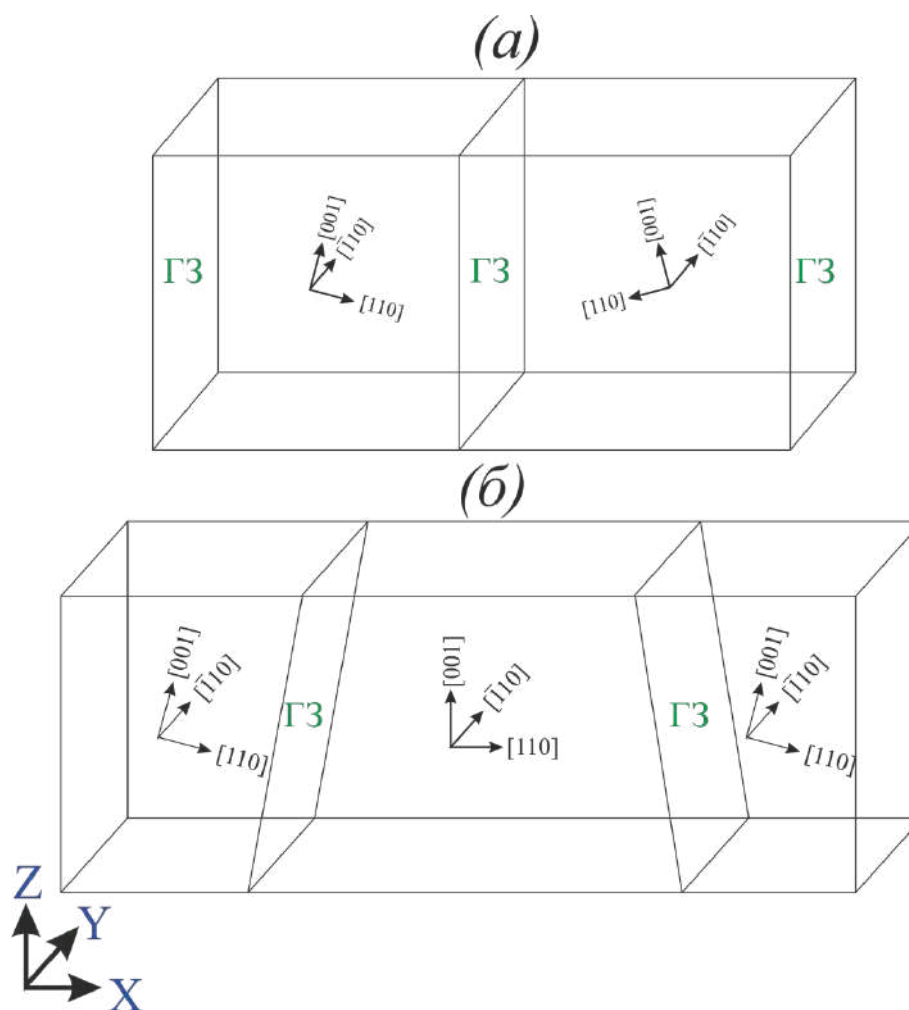


Рис. 2.2. Схема исследуемых бикристаллов с маркировкой кристаллографической ориентации зерен и расположения ГЗ: малый бикристалл (а), бикристалл удлиненной формы (б).

Метод классической МД используется для исследования отклика границ зерен на приложенный сдвиг. МД моделирование выполняется с использованием кода LAMMPS [115], где межатомное взаимодействие определяется потенциалом для меди [144], алюминия [145] и никеля [146] – все выбранные потенциалы разработаны в парадигме погруженного атома (EAM), которая подробно описана в пункте 1.3.5. Несколько ГЦК металлов выбрано для исследования возможного различия в поведении зернограницных дислокаций в процессе сдвиговой деформации - это может произойти из-за разницы в энергии дефекта упаковки в рассмотренных

металлах. В соответствии с экспериментальными данными и первопринципными расчетами [144-146] значение энергии дефекта упаковки для алюминия примерно в три раза выше по сравнению с медью, а значение для никеля находится имеет промежуточное значение.

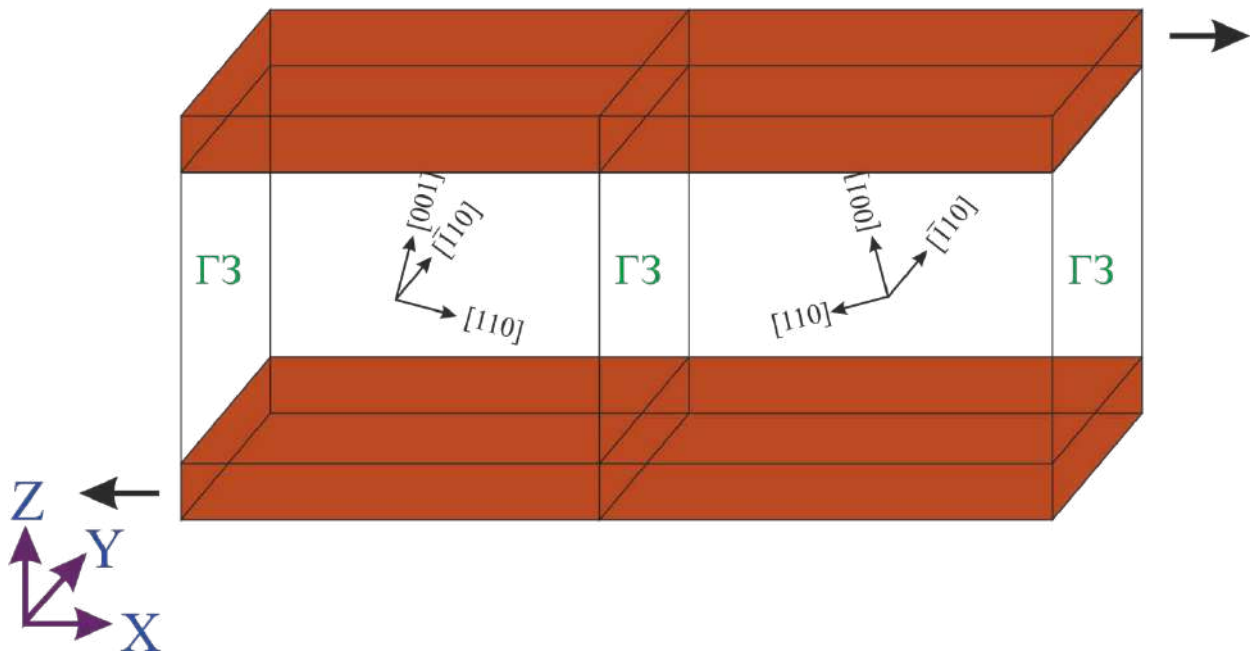


Рис. 2.3. Реализация сдвиговой деформации бикристаллов: в областях, отмеченным красным цветом, атомам придается равномерная скорость, а остальная часть кристалла (без цветового обозначения) являются областью для исследования движения ГЗ.

Реализация сдвиговой деформации методом МД происходит следующим образом. Сначала МД система под действием термостата нагревается до температуры $T = 300$ К, затем компоненты тензора напряжений σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{zz} независимо друг от друга поддерживаются около нуля при фиксированной температуре 300 К. На этом этапе используется ансамбль частиц NPT (с постоянным числом частиц, давлением, температурой), где температура и компоненты напряжения поддерживаются с помощью термостата и баростата Нозе-Гувера. После нагрева и релаксации системы выбираются две области: в нижней и верхней частях бикристалла

высотой 0.9 нм - во время стадии деформации, атомы выбранных слоев кристалла перемещаются с противоположной, но равной по абсолютной величине скоростью вдоль оси X (схема деформации показана на рисунке 2.3). Во время деформации сдвига температура поддерживается на уровне 300 К с помощью термостата Нозе-Гувера и используется ансамбль частиц NVT (с постоянным числом частиц, объемом, температурой). Значения скоростей сдвига находятся в диапазоне 1-15 м/с, что соотносится со скоростью деформации от 9.3×10^7 до $4.6 \times 10^8 \text{ с}^{-1}$. Периодические граничные условия применяются вдоль осей Y и X , чтобы устранить краевые эффекты. По оси Z система является непериодической, чтобы исключить трение между нижним и верхним атомными слоями во время их движения в противоположных направлениях. Такой способ моделирования сдвиговой деформации аналогичен тем, которые используются в экспериментальных работах при изучении движения малоугловых ГЗ наклона в бикристаллах [74, 76-79]. Анализ дислокационных структур осуществляется с помощью кода DXA [118], в то время как анализ атомных структур и визуализация кристаллов осуществляются программой OVITO [117].

2.3. Результаты молекулярно-динамического моделирования движения малоугловых границ зерен наклона

В работе рассматривается только деформация сдвига бикристаллов поперек плоскости ГЗ, поэтому взаимного смещения зерен вдоль границы не происходит. В процессе сдвига происходит движение ГЗ в одно из зерен кристалла - это движение приводит к росту того зерна, которое наиболее выгодно ориентировано относительно направления сдвига. Периодические граничные условия вдоль оси X приводят к возникновению в расчетной области двух стенок дислокаций, движущихся друг к другу. Процесс движения зернограничных дислокаций сопровождается релаксацией

сдвиговых напряжений, возникающих из-за приложенной внешней деформации. Структура рассматриваемой малоугловой симметричной ГЗ наклона может быть представлена набором периодически расположенных полных краевых дислокаций, а миграция ГЗ - движением стенки полных краевых дислокаций. В рассматриваемых МД системах плотность зернограницных дислокаций возрастает вместе с углом разориентировки, рисунок 2.4(а), как это и предсказывается теорией [2, 29]. В то же время, между результатами МД и теоретическими расчетами есть определенная разница. Это несоответствие связано с тем, что дислокации на краях МД системы вдоль оси Z могут отсутствовать из-за произвольного выбора высоты системы при ее создании (рисунок 2.5 – рисунок 2.8), что уменьшает полученную поверхностную плотность дислокаций в МД моделировании. Сравнение энергий границ, полученных в МД моделировании, с экспериментальными, теоретическими и МД расчетами других авторов, рисунок 2.4(б, в), подтверждает, что полученные структуры ГЗ в данном исследовании близки к экспериментально наблюдаемым и полученным численно другими авторами.

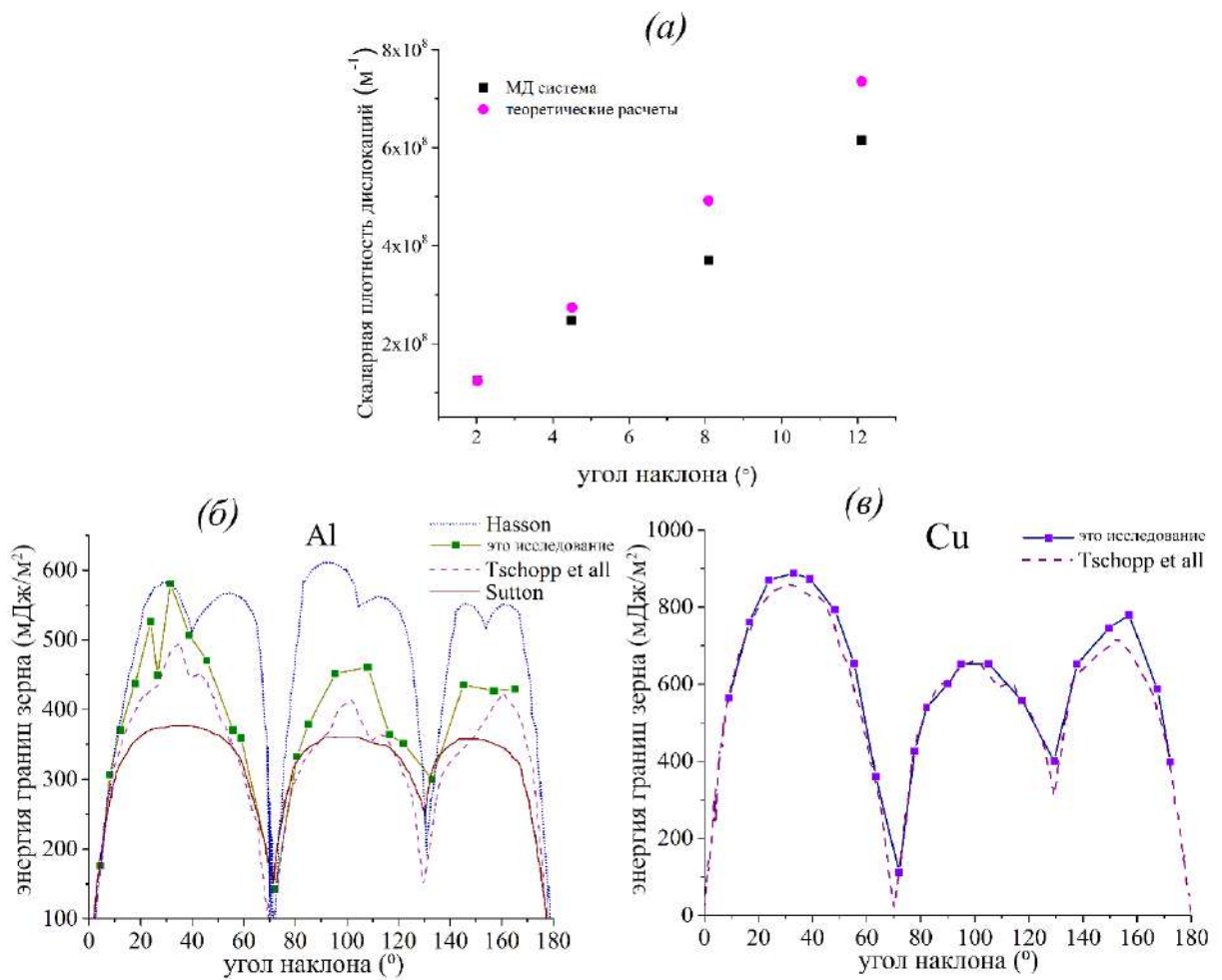


Рисунок 2.4. (а) сравнение плотности дислокаций в плоскости ГЗ в бикристаллах алюминия и соответствующие теоретические расчеты [2, 29]; (б) кривая энергии ГЗ для бикристаллов алюминия и сравнение с данными из других работ: Hasson [147] - теоретические расчеты, Tschopp et al. [44] - данные МД моделирования и Sutton [148] - экспериментальная данные; (в) кривая энергии ГЗ для бикристаллов меди и сравнение с данными МД моделирования авторов Tschopp et al. [44].

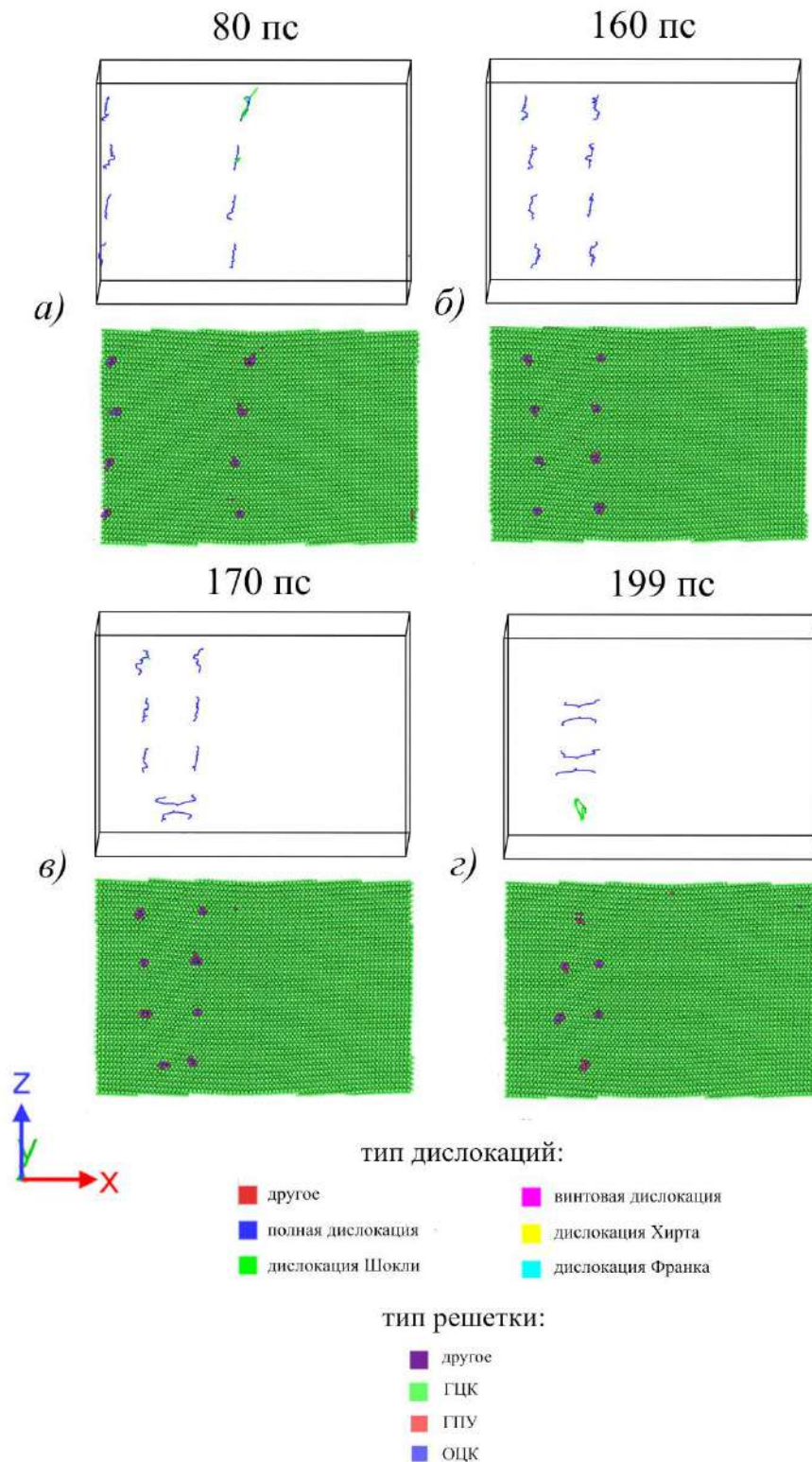


Рис. 2.5. Движение малоугловой ГЗ наклона в алюминиевом бикристалле с углом разориентировки зерен 4.5° при скорости сдвига 5 м/с: (а) начало движения дислокационных стенок под действием сдвиговых напряжений, (б)

дальнейшее движение стенок дислокаций друг к другу, (в) начало аннигиляции дислокаций при сближении противоположных ГЗ, (г) аннигиляция оставшейся части ГЗ при дальнейшем взаимодействии дислокаций. На рисунке объединены результаты алгоритма DXA [118], на котором показаны обнаруженные сегменты линий дислокаций - верхние изображения, и атомные изображения, окрашенные в соответствии с типом решетки - нижние изображения.

МД моделирование деформации алюминиевых бикристаллов (рисунок 2.5) показывает, что ГЗ двигается без каких-либо существенных реакций расщепления и зернограницные дислокации остаются полными, в отличие от случая движения уединенной дислокации в алюминии, которая расщепляется на две частичных дислокации Шокли [98]. “Полная” дислокация означает, что её скольжение преобразует решетку в эквивалентное, но смещенное состояние, в отличие от частичной дислокации, оставляющей после себя дефект упаковки в плоскости скольжения. Стенка дислокаций, набирает скорость с началом деформации. Затем движение границы во многом зависит от сил дислокационных взаимодействий. В данном бикристалле не наблюдается зарождения частичных дислокаций на ГЗ и какого-либо существенного сопротивления со стороны противоположной границы. На ранней стадии движения между противоположными ГЗ не происходит значительного взаимодействия.

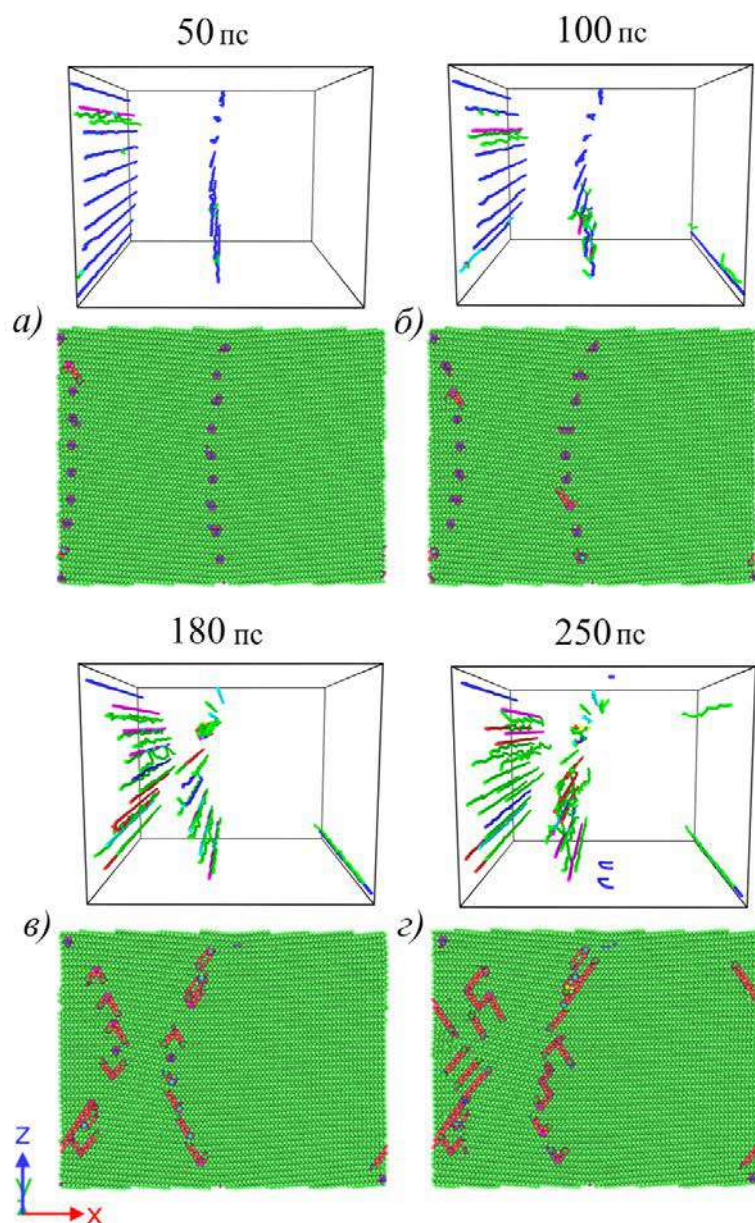


Рис. 2.6. Движение малоугловых ГЗ наклона в медном бикристалле с углом разориентировки зерен 9° при скорости сдвига 5 м/с: (а) начало движения дислокационной стенки под действием сдвиговых напряжений, (б) изгиб исходной конфигурации ГЗ при деформации сдвига, (в) остановка ГЗ и начало испускания частичных дислокаций с границы, (г) дальнейший процесс эмиссии частичных дислокаций с ГЗ и проскальзывание зародившихся частичных дислокаций в зерна бикристалла (цветовая схема типов дислокаций и решетки представлена на рисунке 2.5).

Движение ГЗ может сопровождаться реакциями расщепления полных краевых дислокаций, составляющих границу. Такое поведение наблюдается при деформации медного бикристалла как материала с более низкой энергией дефекта упаковки (рисунок 2.6). Красный цвет на атомных представлениях бикристалла на рисунке 2.6 соответствует ГПУ решетке, составляющей дефект упаковки, образованный движением частичных дислокаций. Реакции расщепления приводят к эмиссии частичных дислокаций с ГЗ и соответствующим изменением структуры зернограницных дислокаций. Наиболее частый пример таких реакций - расщепление полной дислокации на частичную дислокацию Шокли и дислокацию Франка с последующим проскальзыванием дислокации Шокли в зерна бикристалла и пребыванием дислокации Франка в исходном положении внутри границы. Как и в предыдущем случае для алюминия, стенки дислокаций начинают двигаться, но через некоторое время происходит замедление, и ГЗ испускают частичные дислокации в результате реакций расщепления [рисунок 2.6(в)]. Дальнейшего движения ГЗ как единой дислокационной стенки не наблюдается. Формирование и последующее движение частичных дислокаций, которые возникают из-за расщепления полных дислокаций, ведут к релаксации напряжений. Часть краевых зернограницных дислокаций становятся стационарными сегментами и фиксируют положение ГЗ. Разница в поведении границ в бикристаллах алюминия и меди связана с различными энергиями дефекта упаковки в данных металлах - 146 мДж/м^2 для алюминия [145] и 44 мДж/м^2 для меди [144]. Низкое значение энергии дефекта упаковки в меди делает возможным реакции расщепления изначальных полных краевых дислокаций на частичные, которые образуют дефект упаковки при скольжении. Этот процесс можно увидеть на атомном представлении бикристалла (рисунок 2.6).

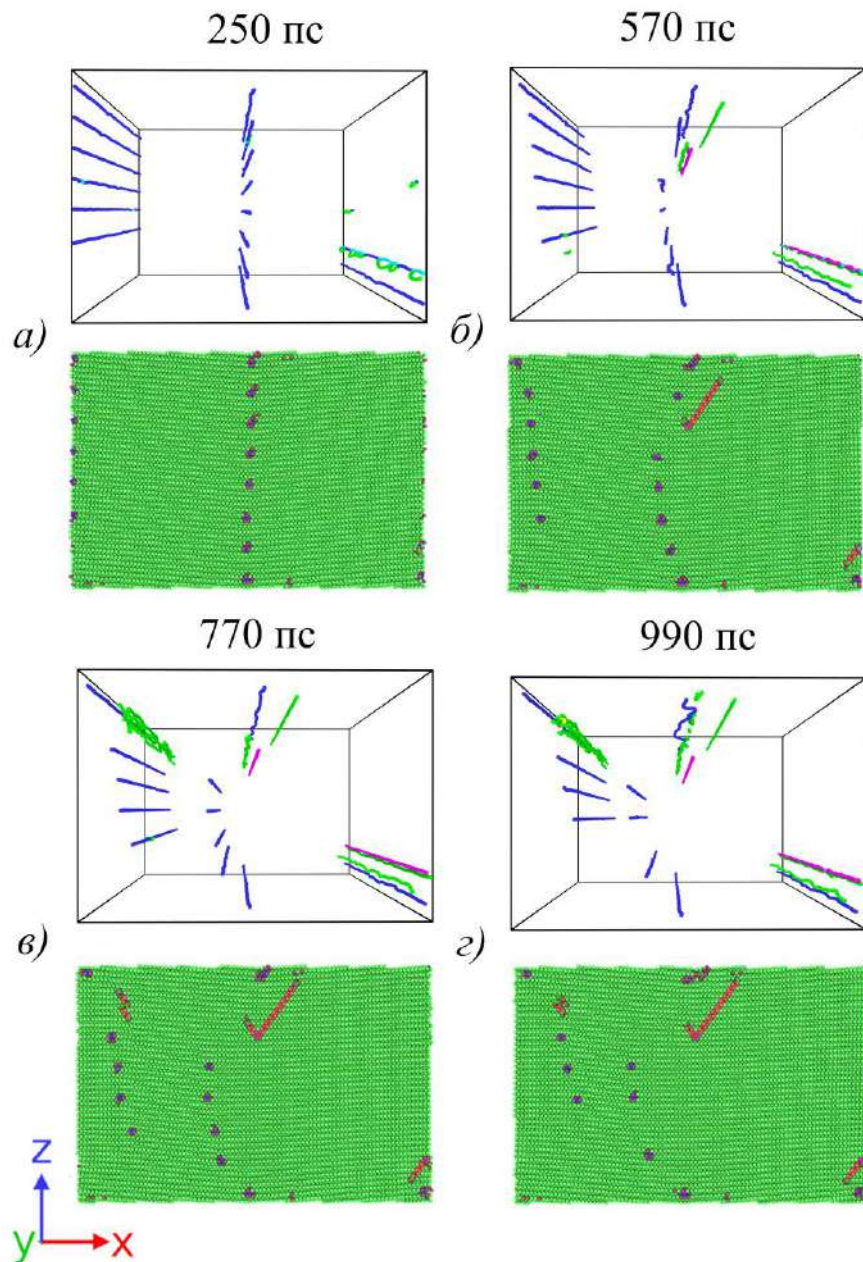


Рис. 2.7. Движение малоугловой ГЗ наклона в никелевом бикристалле с углом разориентировки зерен 7.3° при скорости сдвига 1 м/с: (а) начало движения дислокационной стенки под действием напряжения сдвига, (б) движение ГЗ и начало испускания частичных дислокаций из некоторых зернограничных полных дислокаций, (в)-(г) дальнейшее движение нераспавшихся зернограничных полных дислокаций под действием сдвиговой деформации; цветовая схема для типов дислокаций и решетки представлена на рисунке 2.5.

Поведение ГЗ в никелевых бикристаллах в процессе деформации сдвига (рисунок 2.7) является промежуточным между случаями алюминия и меди: часть полных краевых дислокаций расщепляются на частичные дислокации [рисунок 2.7(б) - рисунок 2.7(в)] во время движения ГЗ, в то время, как остальные зернограничные дислокации продолжают двигаться, пока не встретятся с противоположной границей. Эта особенность также имеет отношение к значению энергии дефекта упаковки 136 мДж/м^2 в никеле [146], которое находится между значениями для меди и алюминия.

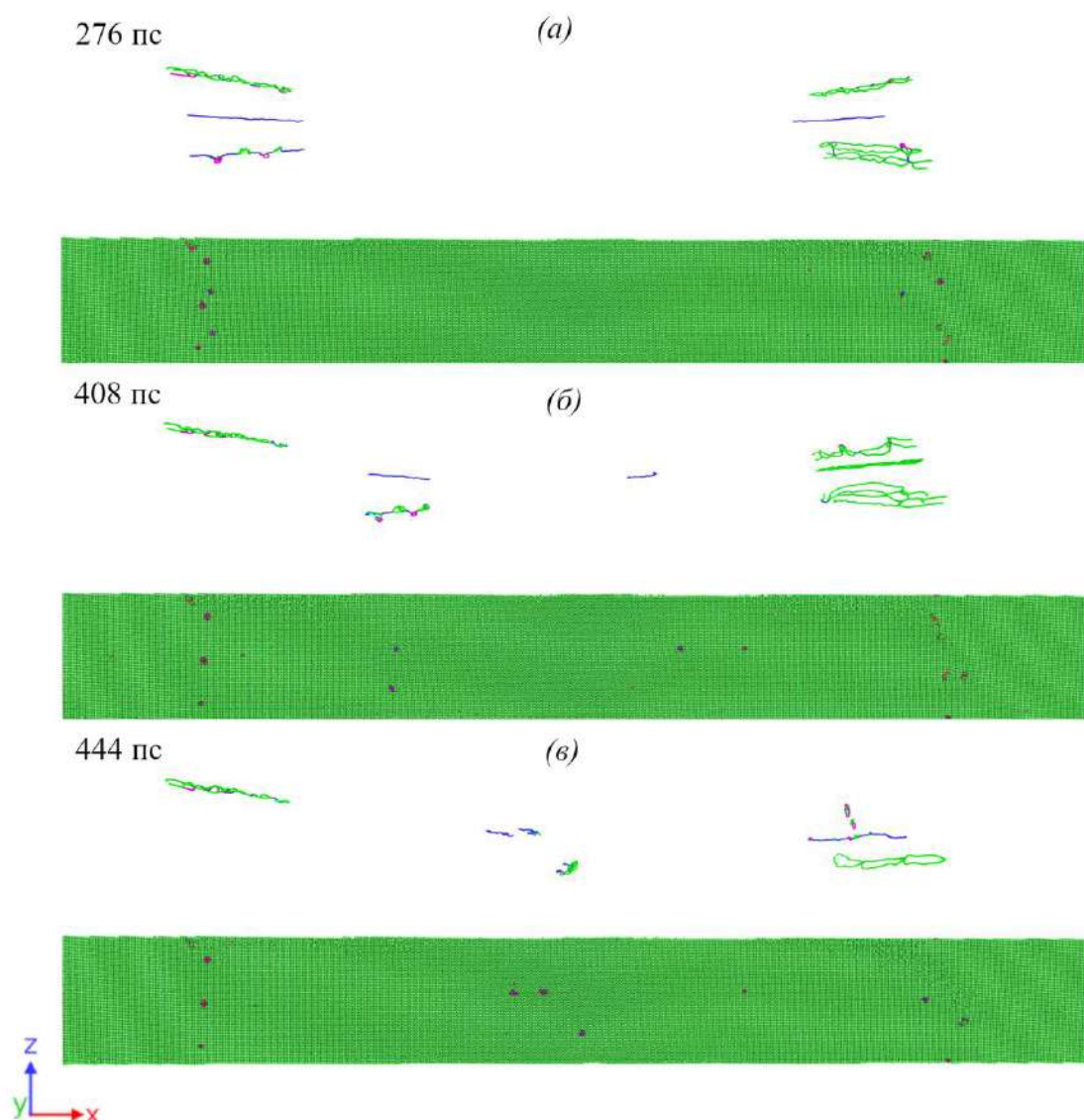


Рис. 2.8. Движение малоугловой ГЗ наклона в удлиненном бикристалле с углом разориентировки зерен 6° при скорости сдвига 2 м/с: (а) начало деформации и возникновение неустойчивости, когда только часть дислокаций с границы перемещается в центральное зерно; (б) дальнейшее развитие неустойчивости - движение части ГЗ в центральном зерне кристалла и остановка отставшей части границы; (в) аннигиляция движущихся дислокаций, когда части противоположных ГЗ приближаются друг к другу. Цветовая схема для типов дислокаций и решетки представлена на рисунке 2.5.

Конфигурация удлиненного бикристалла используется для увеличения свободного пробега зернограницных дислокаций. Динамика ГЗ дислокаций представлена на рисунке 2.8. Распределение сдвиговых напряжений вокруг одной из границ на рисунке 2.9: сначала рассчитывается тензор напряжений на атом [149], затем вычисленные значения σ_{xz} усредняются по сферической области диаметром 1 нм для построения карты локальных сдвиговых напряжений в кристалле. При деформации сдвига удлиненного бикристалла наблюдается неустойчивость миграции ГЗ как единой структуры (рисунок 2.8) – часть дислокаций остается в исходном положении, которое они имеют до начала деформации [рисунок 2.8(в)]. Этот эффект можно объяснить следующим образом. Еще до деформации ГЗ становятся гофрированными: часть дислокаций движется внутрь центрального зерна, а другая часть смещается в противоположном направлении. Расталкивание зернограницных дислокаций происходит за счет взаимодействия дислокаций одного знака и ограничивается затратами упругой энергии в дислокационных следах, возникающей при их перемещении. Во время деформации сдвига дислокации, смещенные в центральное зерно (отмечены зеленым цветом на рисунке 2.9), испытывают дополнительное отталкивание от отставшей части дислокаций (отмечены фиолетовым цветом на рисунке 2.9), что создает более высокие сдвиговые напряжения в окрестности “зеленых” дислокации и заставляет их продвигаться внутрь центрального зерна (рисунок 2.9). Подобный эффект искажения исходной формы малоугловых ГЗ наклона (то есть сдвиг некоторых зернограницных дислокаций по отношению к другим) в присутствии внешних дислокаций был показан в работе [20]. Напротив, “фиолетовые” дислокации, смещенные в боковые зерна, испытывают отталкивание от “зеленой” группы дислокаций, которое направлено в противоположную сторону и снижает действие приложенной деформации сдвига. Таким образом, “фиолетовые” дислокации остаются неподвижными.

В дальнейшем “зеленые” подвижные дислокации релаксируют локальные напряжения [98]; следовательно, на отстающие “фиолетовые” дислокации действуют более низкие сдвиговые напряжения, что приводит к дальнейшему развитию неустойчивости, то есть преобладающему движению одних дислокаций в ГЗ и отставанию или неподвижности других зернограничных дислокаций (рисунки 2.9 – 2.10). На завершающей стадии движения подвижные “зеленые” дислокации из одной ГЗ встречаются с подвижными дислокациями из противоположной ГЗ, что ведет к аннигиляции дислокаций [рисунок 2.8(в)] - это аналогично случаю бикристалла алюминия [рисунок 2.5(в, г)]. Интересно отметить, что рассмотренное движение зернограничных дислокаций с неустойчивостью окончательно удерживает часть ГЗ на исходном месте, но уменьшает углы разориентировки, так как количество дислокаций остающихся в ГЗ становится меньше. Учитывая форму бикристалла, можно предположить, что такое поведение может быть присуще удлинённым зернам, тогда как поведение ранее рассмотренных малых бикристаллов ближе к случаю равноосных зерен.

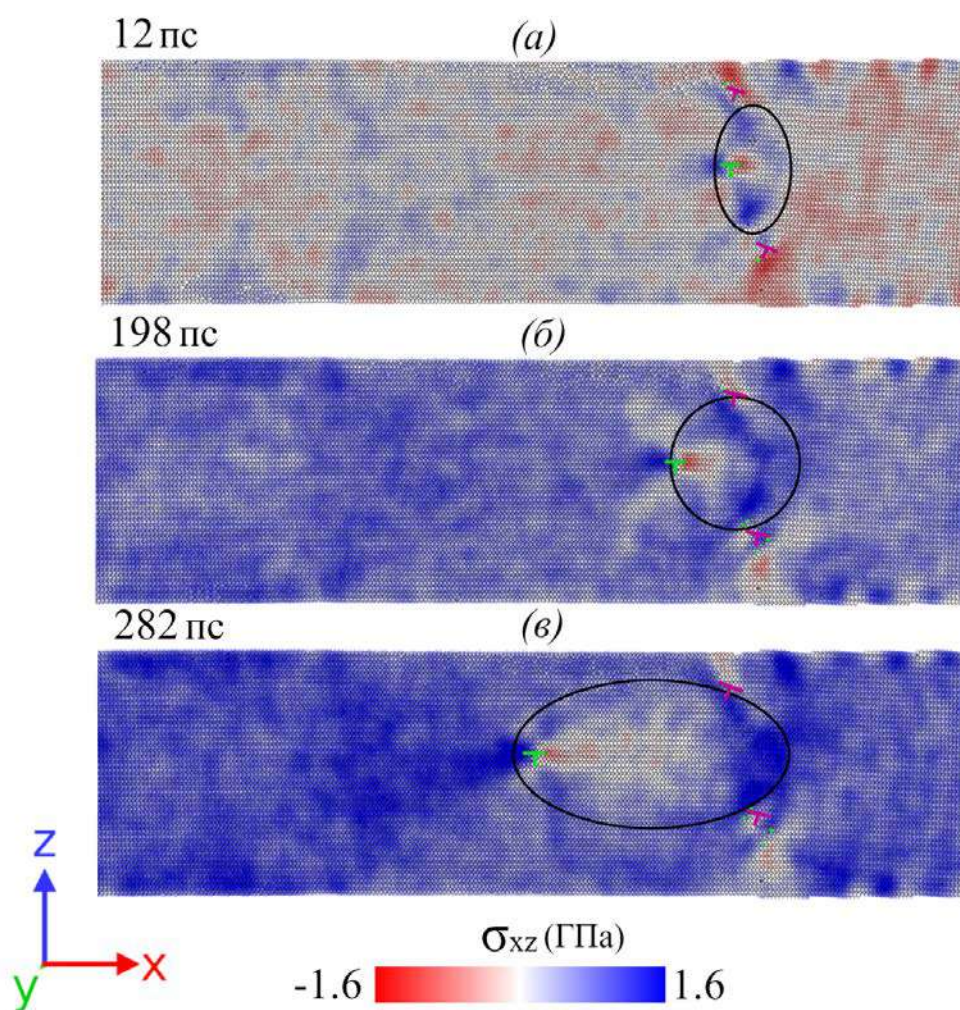


Рис. 2.9. Неустойчивость миграции ГЗ как единой структуры и распределение локальных сдвиговых напряжений в удлинённом бикристалле с углом разориентировки зерен 6° при скорости сдвига 2 м/с: (а) увеличение локальных сдвиговых напряжений вокруг дислокации (зеленых), которые находятся в зерне с ориентацией решетки параллельной направлению сдвига, (б) начало движения «зеленых» дислокаций, (в) дальнейшее движение «зеленых» дислокаций в бикристалле и релаксация локальных сдвиговых напряжений перед отстающими дислокациями (фиолетовые).

В МД исследовании авторы [98] показали, что уединенная движущаяся дислокация релаксирует сдвиговое напряжение в следах своего движения, что приводит к существенно неравномерному распределению напряжений в

кристалле и влияет на движение дислокации. Анализ данных МД моделирования показывает, что области с отрелаксированными напряжениями наблюдаются также в случае движения малоугловых ГЗ наклона в бикристаллах. Следующее поведение можно увидеть на рисунках 2.10 - 2.11: локальные напряжения сдвига увеличиваются в областях перед дислокациями (где ГЗ ещё не прошла) и существенно уменьшаются в следах дислокаций за смещенными ГЗ. Как известно, движение дислокации определяется окружающим напряжением сдвига [2]; поэтому необходимо учитывать релаксацию напряжений в зонах за движущимися дислокациями.

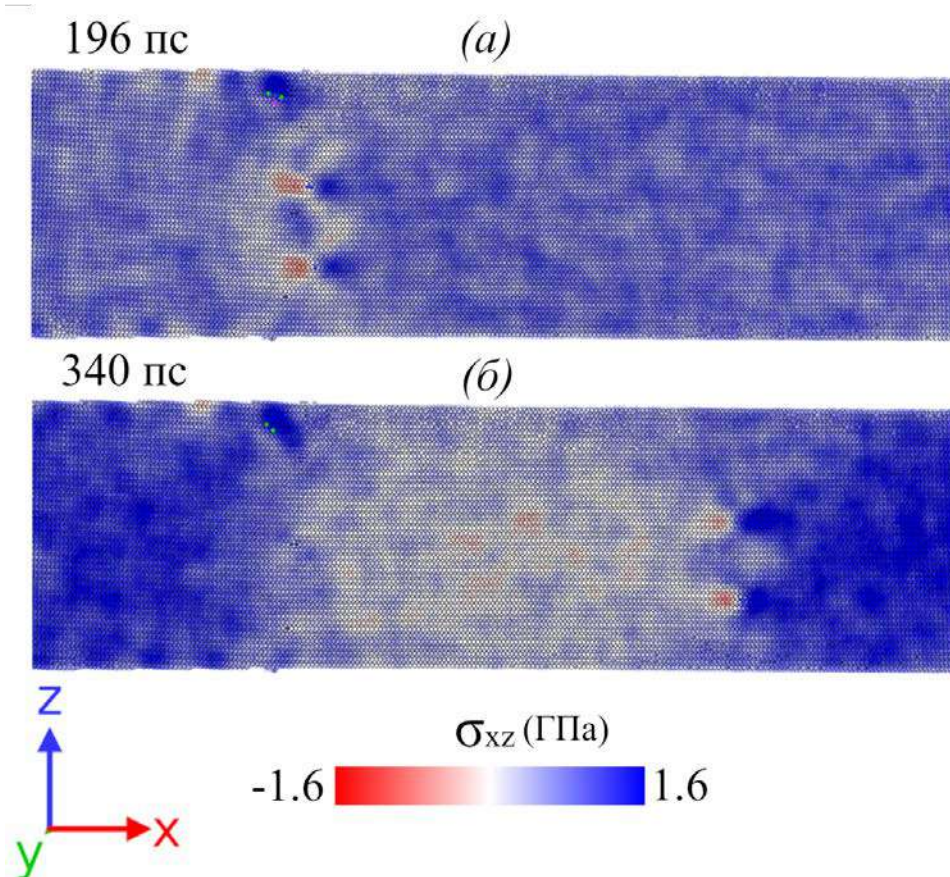


Рис. 2.10. Карты локальных сдвиговых напряжений (σ_{xz}) во время деформации удлиненного алюминиевого бикристалла с углом разориентировки 6° при скорости сдвига 2 м/с: (а) начало движения ГЗ, (б) движение ГЗ под действием приложенных напряжений сдвига и релаксация локальных напряжений в кристалле за движущимися дислокациями.

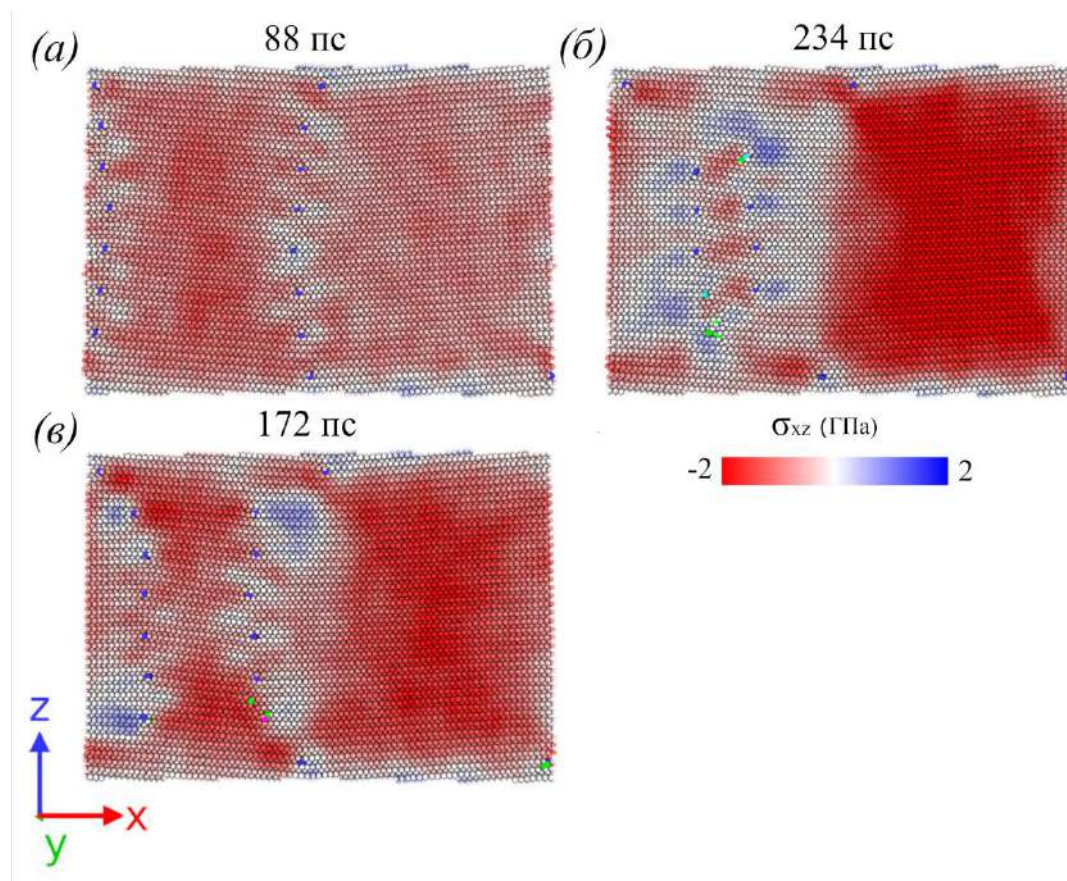


Рис. 2.11. Карта локальных напряжений сдвига (σ_{xz}) в процессе деформации алюминиевого бикристалла с углом разориентировки 9° при скорости сдвига 5 м/с: (а) напряженное состояние бикристалла в начале деформации, (б) релаксация напряжений за движущимися дислокациями, (в) распределение локальных напряжений в бикристалле до взаимодействия зернограничных дислокаций из противоположных ГЗ. Знак приложенной внешней деформации сдвига противоположен случаю удлиненного бикристалла на рисунках 2.9 и 2.10.

2.4. Результаты теоретической модели движения малоугловых границ зерен наклона

В этом разделе проводится сравнение результатов теоретической модели движения ГЗ как стенки краевых дислокаций в фиксированных плоскостях скольжения с данными, полученными из МД моделирования.

Параметры теоретической модели представлены в таблицах 2.1 – 2.3. Большинство параметров выбрано так, чтобы обеспечить наилучшее соответствие результатов модели и данных МД моделирования (параметрическое исследование представлено в разделе 2.5). Некоторые значения, такие как количество и плотность дислокаций, вытекают из постановки задачи, в то время как другие (поперечная скорость звука) определяются из независимых МД исследований.

В теоретической модели движение ГЗ симметрично; поэтому проанализируем результаты только на примере левой ГЗ и рассмотрим общие закономерности движения зернограничных дислокаций на примере бикристалла алюминия с углом разориентировки 4.5° и скоростью сдвига 5 м/с (рисунки 2.12 - 2.13). Область отрелаксированных напряжений за движущимися дислокациями существенно влияет на силы, действующие на все дислокации в системе, и определяет три различных стадии движения в соответствии с условиями, сформулированными в уравнениях (2.6) и (2.7).

ГЗ находятся в состоянии покоя до 40 пс, поскольку действующее напряжение ниже порогового значения $Y/2$; локальные и средние напряжения совпадают, рисунок 2.13(а). Через 40 пс зернограничные дислокации начинают двигаться, область отрелаксированных напряжений растет, и значение локальных напряжений начинает уменьшаться, несмотря на продолжающийся рост, как деформации сдвига, так и напряжения $\sigma_{xz}^{(0)}$ в пластически недеформированной области. Рост средних напряжений замедляется с началом движения ГЗ - рисунок 2.13(а). Изначально дислокации одной стенки выстраиваются по вертикальной линии, и силы взаимодействия между ними согласно формуле (2.8) равны нулю, потому что для них $\Delta x_{ij} = 0$ - рисунок 2.13(б). Дислокации противоположных ГЗ испытывают взаимное притяжение. Однако в начале моделирования силы

притяжения компенсируются, так как для текущей ГЗ есть две противоположные границы, которые находятся с разных сторон, но на равных расстояниях (что возникает из-за периодических граничных условий по оси X). Начало движения ГЗ приводит к уменьшению расстояния до одной из противоположных границ и одновременному увеличению расстояния до другой. Поэтому сила взаимодействия между дислокациями увеличивается, рисунок 2.13(б), и становится больше для центральных дислокаций (2 и 3), которые и движутся вперед, рисунок 2.12(а, б). Увеличение силы взаимодействия дислокаций уравнивает спад локального сдвигового напряжения. В результате, после начала движения зернограничных дислокации на стадии I (40–140 пс), общая сила, действующая на дислокацию, остаются почти постоянной, как и приращение скорости дислокации [рисунок 2.13(б)].

Когда пройденное зернограничной дислокацией расстояние превышает размер области локализации a , область отрелаксированных напряжений $\sigma_{xz}^{(0)}$ вокруг дислокации перестает увеличиваться, и локальные напряжения сдвига начинают быстро расти, что соответствует стадии движения II (140–155 пс) – рисунок 2.13(а). Одновременно происходит и увеличение скорости схождения ГЗ. Дислокационные взаимодействия также способствует этому ускорению, что видно по росту значений междислокационных сил - рисунок 2.13(б). Когда расстояние между противоположными ГЗ сокращается до длины меньшей, чем размер области локализации a , начинается этап III. Область с отрелаксированными напряжениями за противоположной ГЗ попадает в область локализации текущей дислокации, и значение локальных напряжений резко падает - рисунок 2.13(а). Сила взаимодействия между дислокациями при этом быстро растет - рисунок 2.13(б). Это приводит к немонотонному поведению полной силы - рисунок 2.13(б). Сила взаимодействия между дислокациями на краях системы (1 и 4) становится

больше, чем для центральных дислокаций (2 и 3). Это изменение связано с тем, что согласно формуле (2.8), сила дислокационного взаимодействия меняет знак, когда вертикальное расстояние превышает горизонтальное $|\Delta y_{ij}| > |\Delta x_{ij}|$. В результате кривизна ГЗ изменяется на III-м этапе движения, как в теоретической модели, так и в МД моделировании - рисунок 2.12(г). Теоретическая модель хорошо качественно описывает результаты МД моделирования и объясняет изменение формы ГЗ при ее движении до сближения границ и момента аннигиляции зернограничных дислокаций. Уравнение (2.8) справедливо только для расстояний больших радиуса ядра дислокации и его решение расходится, если расстояние между дислокациями стремится к нулю. Следовательно, силы взаимодействия дислокаций в теоретической модели быстро растут и стремятся к бесконечности при сближении противоположных зернограничных дислокаций, движущихся в одних и тех же плоскостях скольжения - рисунок 2.13(б). В результате модель предсказывает более быстрое схождение противоположных ГЗ, по сравнению с результатами МД. Чтобы преодолеть это несоответствие, следует использовать более строгое выражение для силы взаимодействия дислокаций с учетом нелинейной упругости и дискретности в масштабе ядра дислокации.

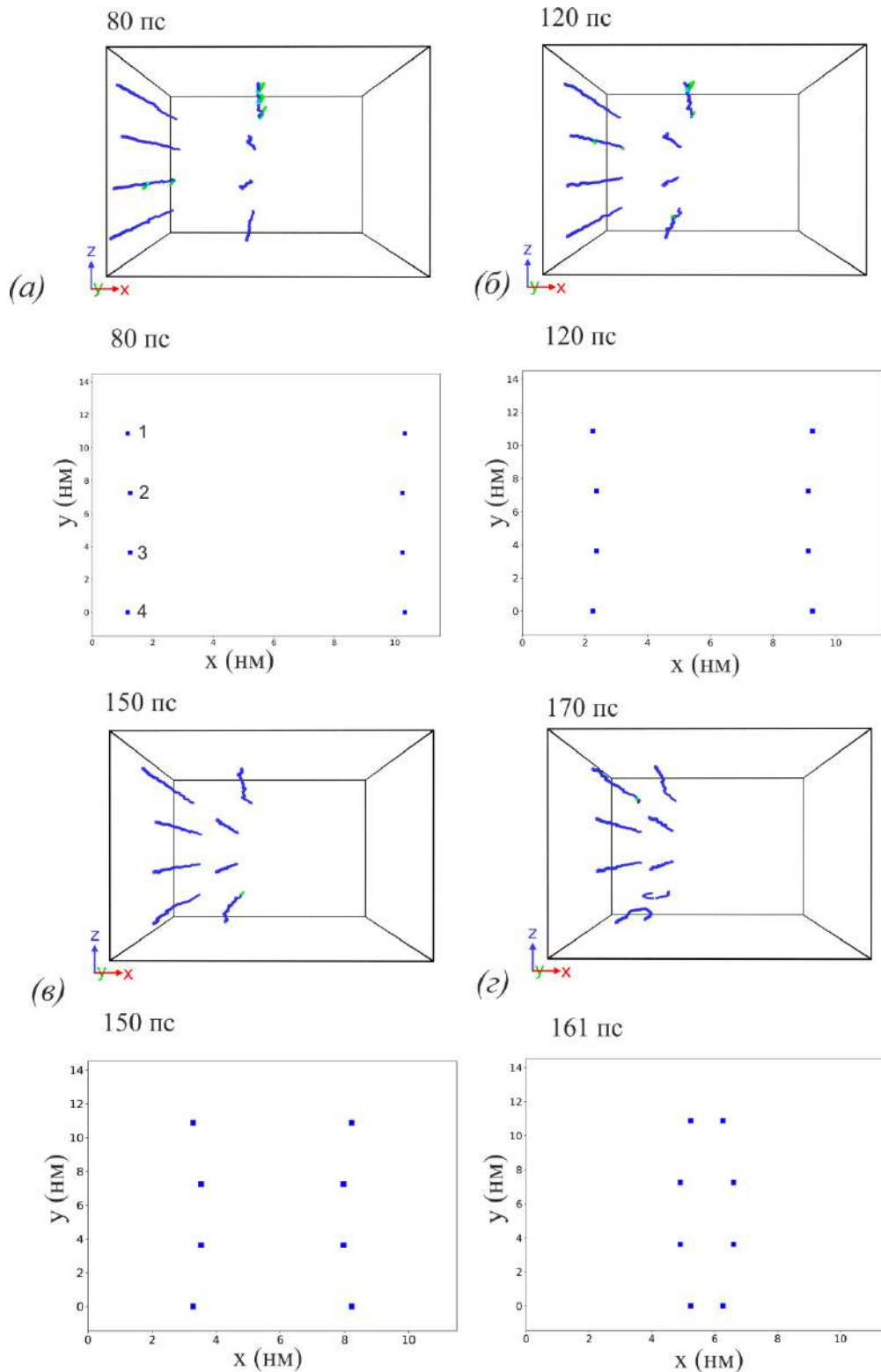


Рис. 2.12. Положения дислокаций, составляющих границу, полученные из МД моделирования (верхние графики) и рассчитанные с помощью теоретической модели (нижние графики) в различные моменты времени для

случая бикристалла алюминия с углом разориентировки 4.5° и скоростью сдвига 5 м/с: (а) движение ГЗ на стадии I при постоянной полной силе; (б) приближение ко II стадии с резким увеличением локальных напряжений и появлением кривизны ГЗ - дислокации в середине ГЗ сдвигаются вперед; (в) ускорение зернограничных дислокаций из-за изменения напряженного состояния вокруг них; (г) изменение кривизны ГЗ, когда верхняя и нижняя дислокации выходят вперед.

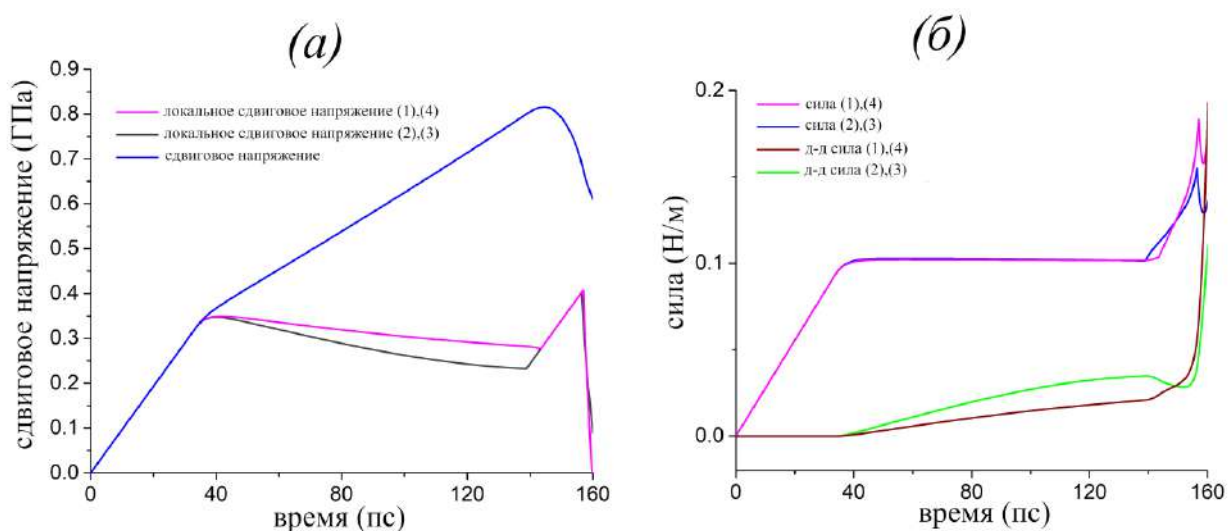


Рис 2.13. (а) средние сдвиговые напряжения в системе и локальные сдвиговые напряжения вблизи каждой дислокации левой стенки; (б) полные силы и силы со стороны остальных дислокаций для каждой дислокации левой стенки. Представлен случай бикристалла алюминия с углом разориентировки 4.5° и скоростью сдвига 5 м/с. Каждая ГЗ содержит 4 дислокации. Из-за симметрии, положения и силы, действующие на 1-ю и 4-ю, 2-ю и 3-ю, дислокации совпадают.

На рисунках 2.14 и 2.15 представлен случай бикристалла алюминия с углом разориентировки 12° . Поведение данного кристалла похоже на рассмотренный выше пример (рисунки 2.12-2.13), но в данной системе ГЗ движется медленнее из-за большего числа зернограничных дислокаций.

Также, проявляется более сильная релаксация напряжений при том же смещении ГЗ по сравнению с бикристаллами, имеющими меньшие углы разориентировки. Это делает стадию III более протяженной по времени (175–240 пс) и позволяет более детально увидеть процессы торможения и изменения кривизны ГЗ на этой стадии. Почти постоянная полная сила действует на дислокации на стадиях I и III (до тесного сближения противоположных ГЗ). В то же время данная сила значительно изменяется на II стадии - рисунок 2.15(б). Кроме того, из-за более высокой плотности дислокаций силы дислокационного взаимодействия становятся сопоставимыми с действием локального напряжения даже на стадии I - рисунок 2.15(б).

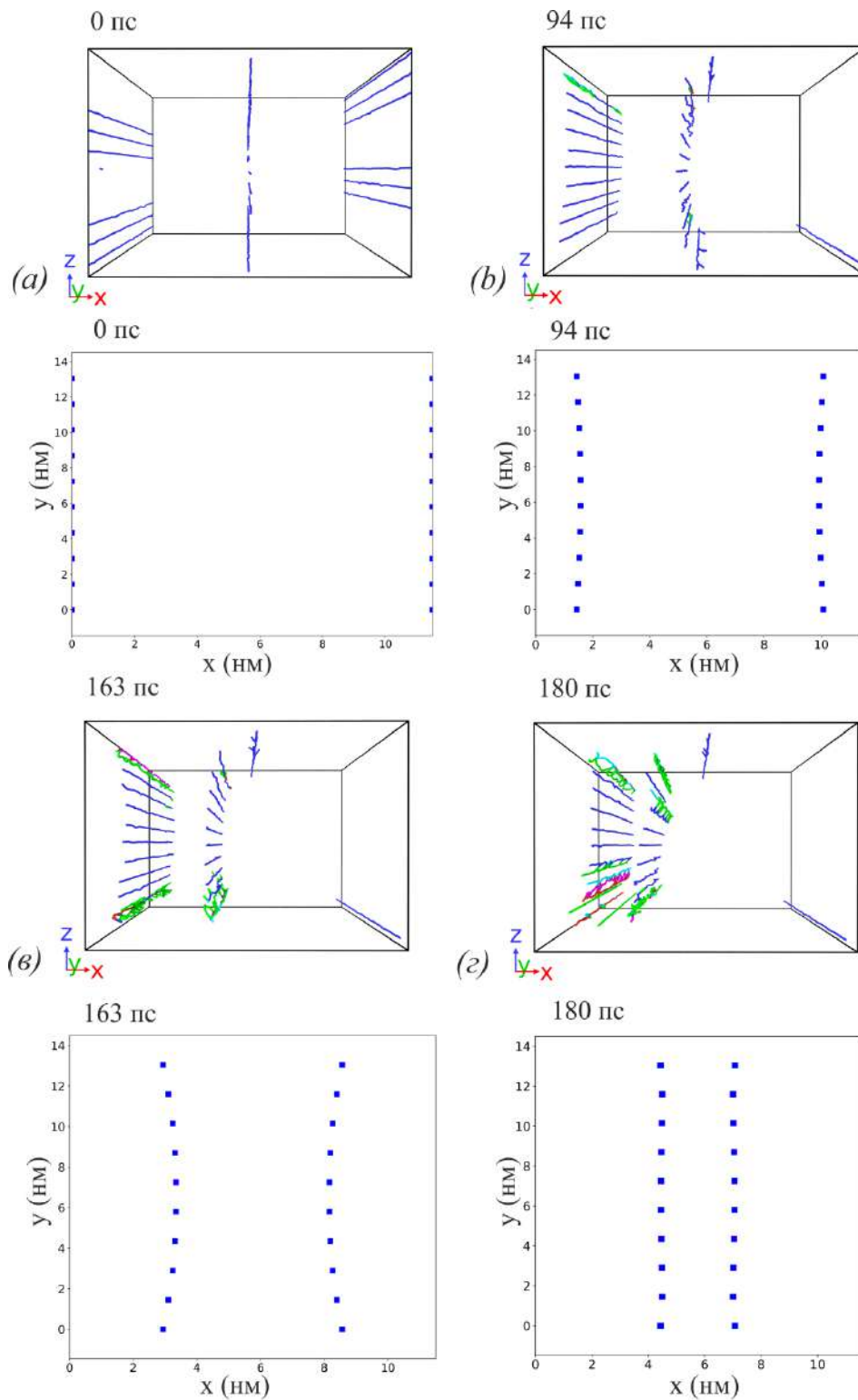


Рис. 2.14. Положения дислокаций, составляющих границу, полученные из МД моделирования (верхние графики) и рассчитанные по теоретической модели (нижние графики) в различные моменты времени для случая бикристалла алюминия с углом разориентировки 12° и скоростью сдвига 10

м/с: (а) начало движения ГЗ; (б) движение ГЗ при постоянной полной силе, также наблюдается более быстрое движение центральных дислокаций; (в) ускорение дислокаций за счет изменения напряженного состояния вокруг них; (г) сближение ГЗ и замедление границ из-за влияния отрелаксированной области противоположных ГЗ.

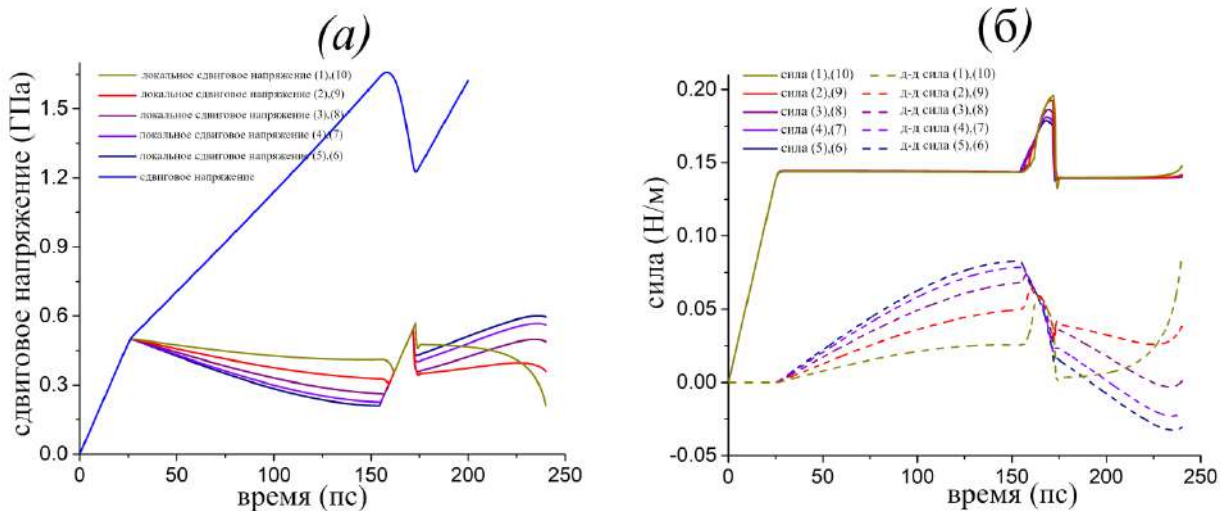


Рис. 2.15. (а) средние сдвиговые напряжения в системе и локальные напряжения вблизи каждой дислокации левой стенки; (б) полные силы и силы со стороны остальных дислокаций для каждой дислокации левой стенки. Представлен случай бикристалла алюминия с углом разориентировки 12° и скоростью сдвига 10 м/с. Каждая ГЗ имеет 10 дислокаций. Из-за симметрии задачи, положения дислокаций и силы попарно совпадают.

Количественные результаты теоретической модели согласуются с данными МД до сближения противоположных ГЗ, как можно заключить из рисунков 2.16–2.19. Теоретическая модель в ее нынешнем виде не учитывает ограничение силы взаимодействия дислокаций на малых расстояниях из-за нелинейной упругости и аннигиляции дислокаций или эмиссии дислокаций при тесном контакте между противоположными границами. Движение ГЗ в МД моделировании может сопровождаться реакциями расщепления полной

дислокации с образованием частичных дислокаций (рисунок 2.7). Также ГЗ может остановиться и испускать частичные дислокации (рисунок 2.6). Это не учитывается в теоретической модели и дает некоторое отклонение для положения ГЗ и среднего напряжения сдвига (рисунок 2.19). Аннигиляция при близком контакте противоположных ГЗ (рисунок 2.5) может привести к отклонению напряженного состояния в модели в отличие от результатов МД моделирования - рисунок 2.16(г, д, е). В соответствии с вышеизложенным, можно выделить на графиках три этапа движения дислокационных стенок в соответствии с условиями уравнений (2.6) и (2.7). На рисунках 2.16–2.19 эти стадии выделены в соответствии со средним положением ГЗ, а не по положению отдельных дислокаций.

На этапе I ГЗ в начале моделирования не двигаются, так как сила, действующая на стенку дислокаций, недостаточна, что наблюдается как в МД расчетах, так и в результатах теоретической модели. В теоретической модели пороговое напряжение определяется членом в формуле (2.13), который зависит от плотности дислокаций ρ_D в системе и от значения постоянной средней силы взаимодействия A . Начало движения дислокационной стенки рассчитанное по модели, совпадает с данными МД моделирования для большинства бикристаллов. Несоответствие наблюдается для бикристалла никеля с углом разориентировки 7.2° [рисунок 2.19(а, б)] и для удлиненного бикристалла алюминия с углом разориентировки 12° [рисунок 2.19(г, д, е)]. Последний случай связан с более сложной картиной движения ГЗ, что подробно описано в разделе 2.3. Начало движения стенки соответствует переходу от упругой к пластической деформации, что видно на графиках напряжение сдвига в обоих случаях: теоретической модели и МД.

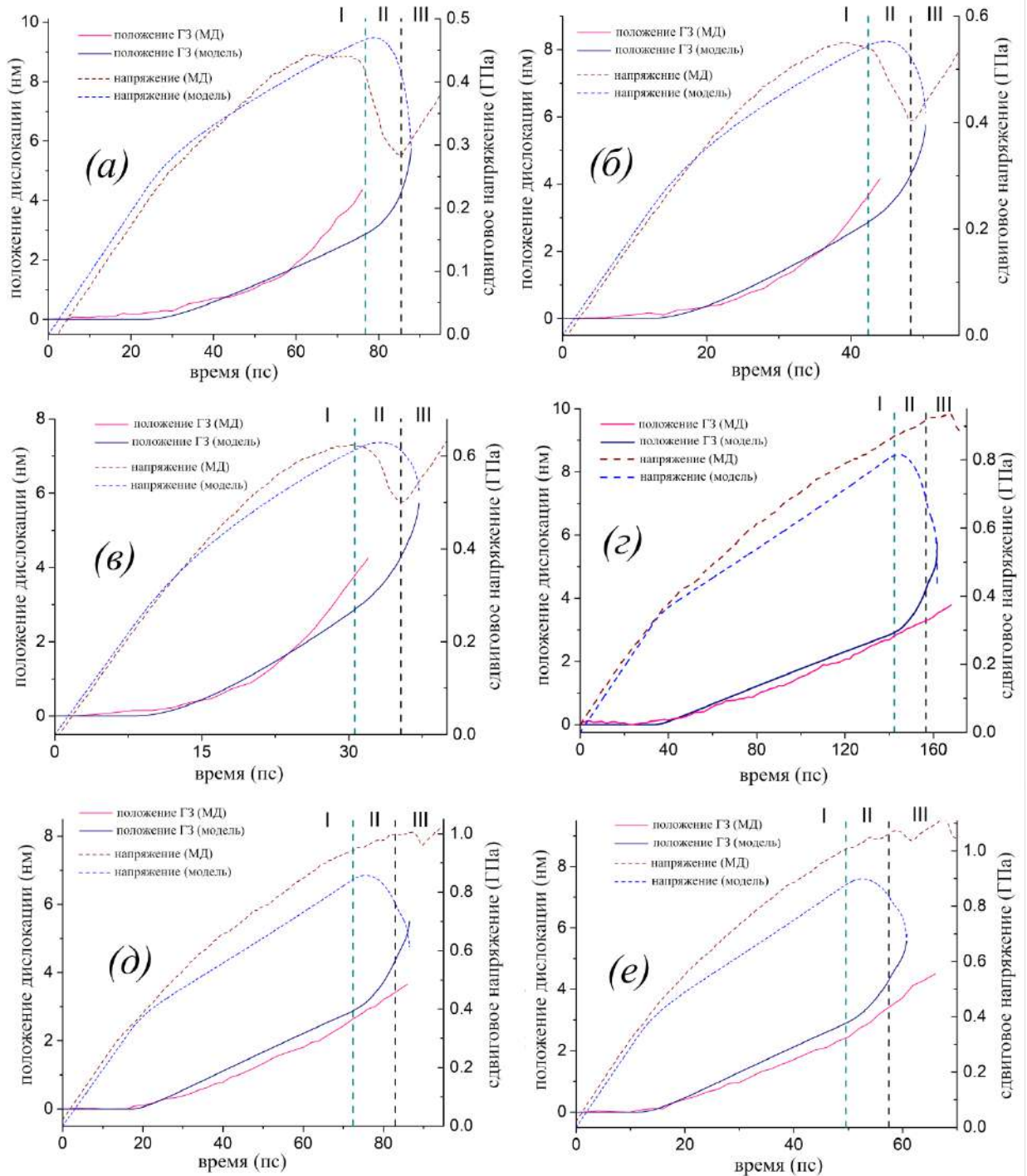


Рис. 2.16. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в алюминиевом бикристалле при перпендикулярном сдвиге: (а), (б) и (в) угол разориентировки составляет 2° и скорости сдвига 5, 10 и 15 м/с, соответственно; (г), (д) и (е) угол разориентировки составляет 4.5° , а скорости сдвига составляют 5, 10 и 15 м/с, соответственно.

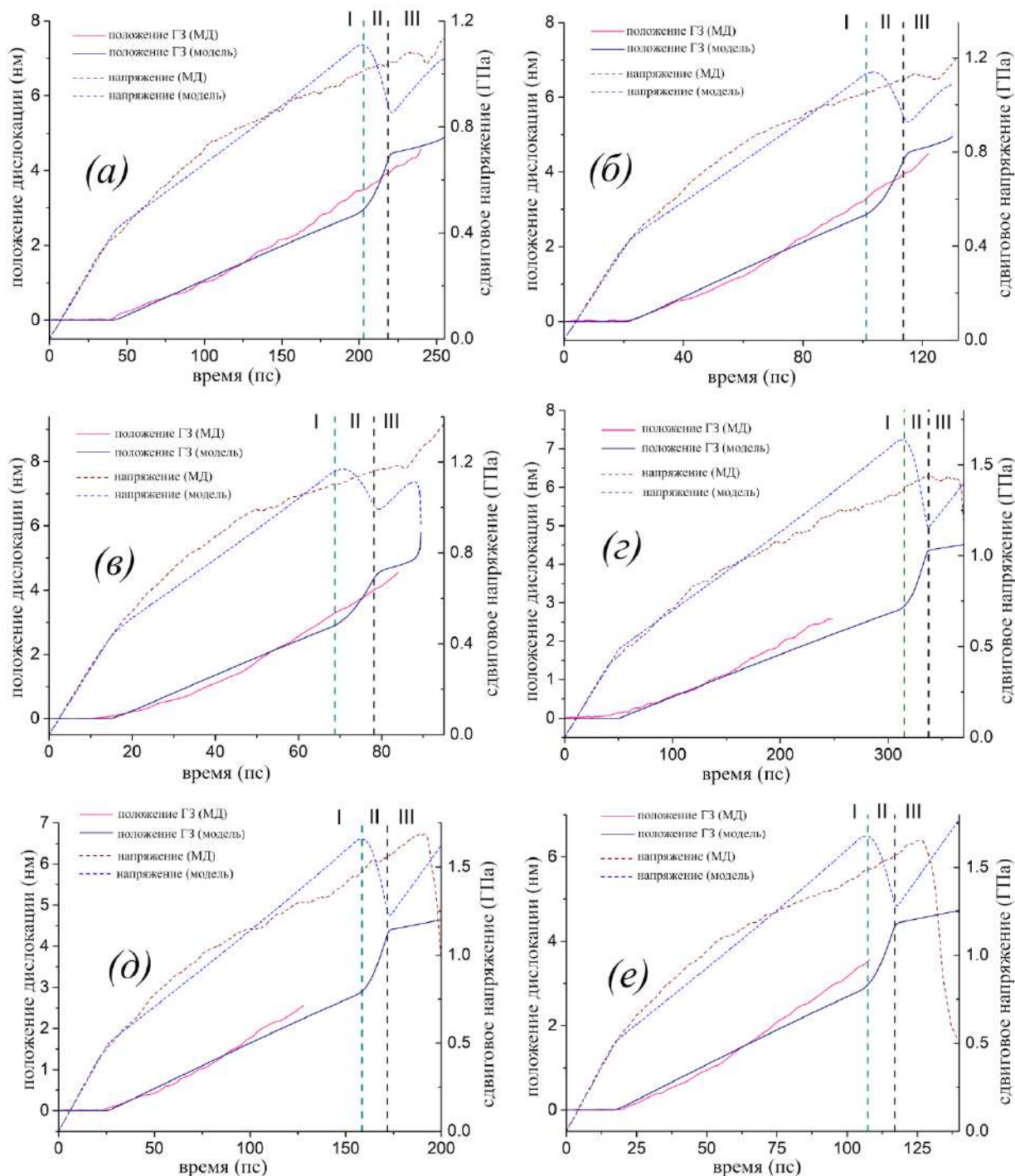


Рис. 2.17. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в алюминиевом бикристалле при перпендикулярном сдвиге: (а), (б) и (в) угол разориентировки составляет 8.1° и скорость сдвига равна 5, 10 и 15 м/с, соответственно; (г), (д) и (е) угол разориентировки составляет 12° и скорость сдвига равна 5, 10 и 15 м/с, соответственно.

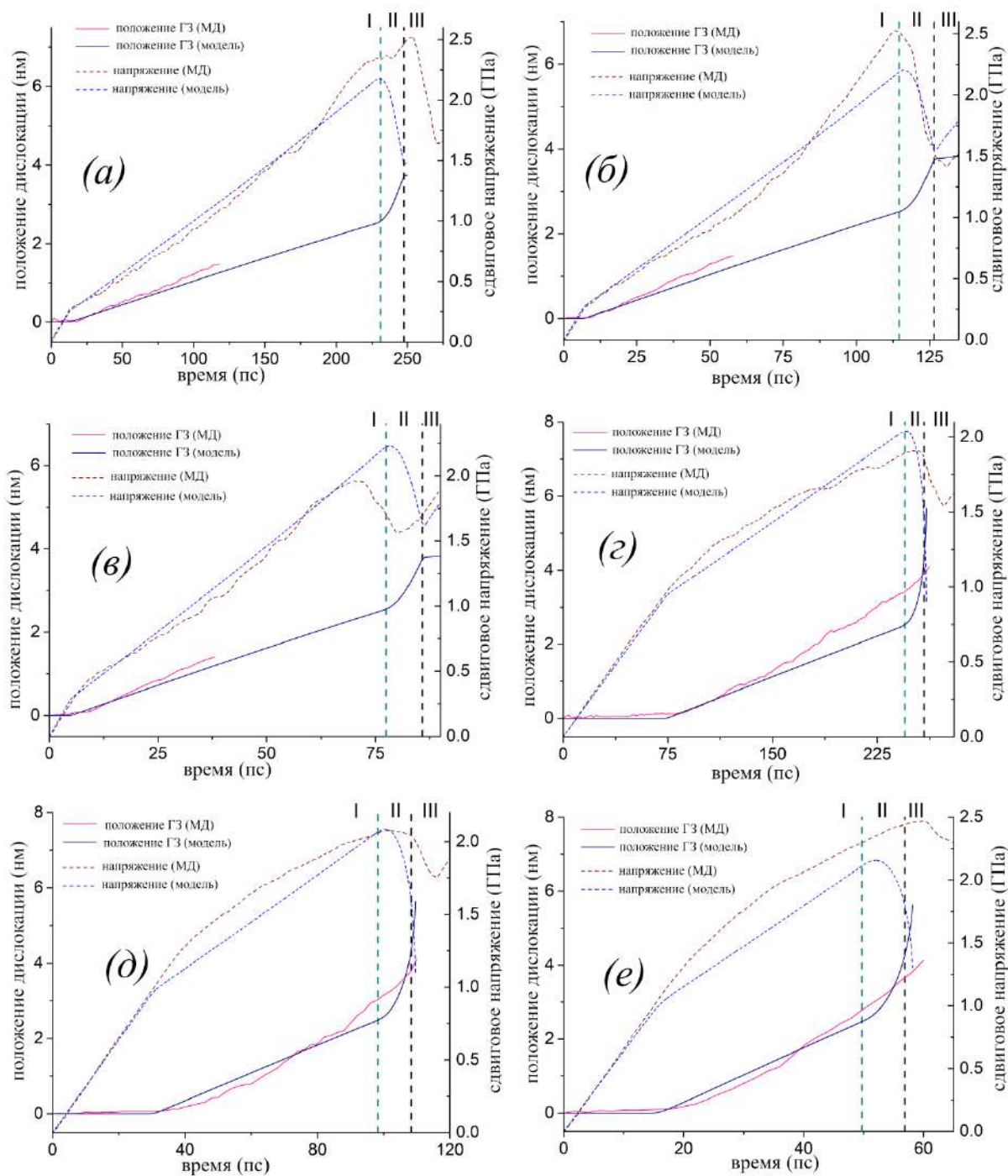


Рис. 2.18. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в медном и никелевом бикристаллах при перпендикулярном сдвиге: (а), (б) и (в) медный бикристалл с углом разориентировки 9° и скоростью сдвига 5, 10 и 15 м/с, соответственно; (г), (д) и (е) бикристалл никеля с углом разориентировки 3.6° при скорости сдвига 2, 5 и 10 м/с, соответственно.

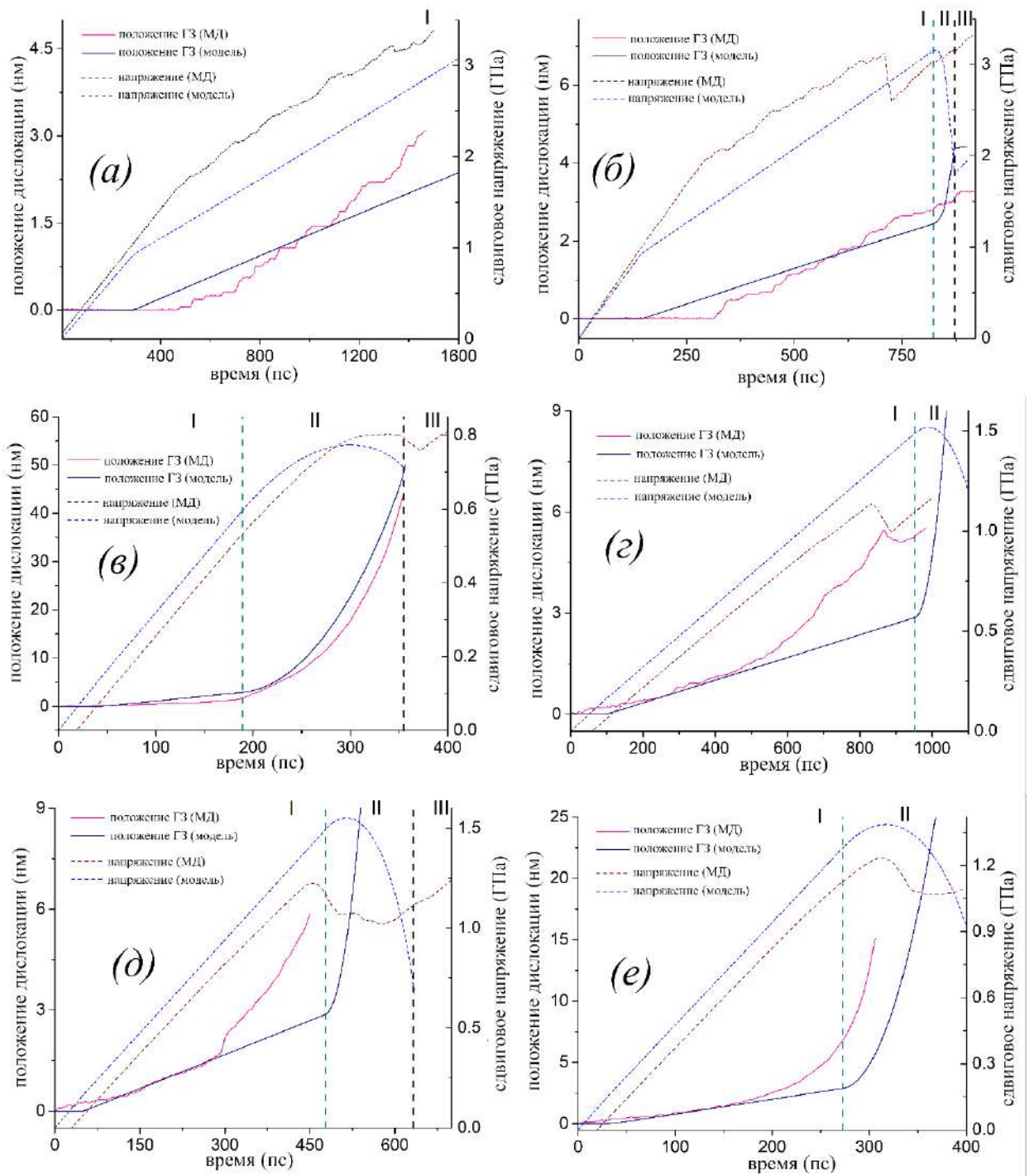


Рис. 2.19. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ в алюминиевом и никелевом бикристаллах при перпендикулярном сдвиге: (а) и (б) бикристалл никеля с углом разориентировки 7.2° при скорости сдвига 0.5 и 1 м/с, соответственно; (в) удлинённый бикристалл алюминия с углом

разориентировки 6° и скоростью сдвига 2 м/с, соответственно; (г), (д) и (е) удлинённый бикристалл алюминия с углом разориентировки 12° и скоростью сдвига 1, 2 и 3 м/с, соответственно.

В теоретической модели кривые сдвиговых напряжений имеют излом, за которым следует переход к стадии движения II - положение ГЗ резко возрастает (соответственно, и скорость границы) на данном этапе и происходит сильная релаксация напряжений. При движении ГЗ в область бикристалла, определяемую условием II, локальные напряжения и полная действующая сила растут - рисунки 2.13, 2.15. Это явление также наблюдается в результатах МД моделирования [рисунок 2.16(а, б, в), 2.17(г, д, е), 2.18(г, д, е), 2.19(в, г, д, е)]. Тем не менее, момент излома на кривой напряжения может отличаться для теоретической модели и МД моделирования. Метод МД описывает более полное физическое поведение и не ограничивается только движением и взаимодействием дислокаций, как это предполагается в разработанной модели - это и объясняет разницу во времени падения напряжений на стадии II в МД моделировании и теоретической модели.

2.5. Параметрическое исследование

На рисунке 2.20 представлены результаты параметрического исследования теоретической модели. Размер области локализации a существенно влияет на эволюцию системы. Уменьшение этого параметра приводит к более медленному движению ГЗ на стадии I с гораздо более высоким значением средних напряжений. Это связано с тем, что в случае малых значений этого параметра, небольшое перемещение ГЗ приводит к значительному уменьшению локальных сдвиговых напряжений, поскольку величина усреднения для вычисления локальных напряжений $2a$ мала. Напротив, после перехода к стадии II более быстрое движение ГЗ начинается

при меньших значениях параметра a из-за более высокого уровня напряжений, рисунок 2.20(а).

Изменение коэффициента трения B практически не влияет на поведение системы на первой стадии движения дислокаций (от 50 до 200 пс), рисунок 2.20(б). На этом этапе общая сила немного превышает порог $bY/2$, рисунок 2.13(б) и 2.15(б). Для изменения B на порядки требуется пропорциональное изменения избытка силы над пороговым значением $bY/2$, что соответствует небольшому изменению общего уровня напряжения. С другой стороны, на стадиях II и III полная сила существенно превышает порог, и имеет место гораздо большее влияние значения B на эволюцию системы: уменьшение B приводит к более быстрой сходимости противоположных ГЗ.

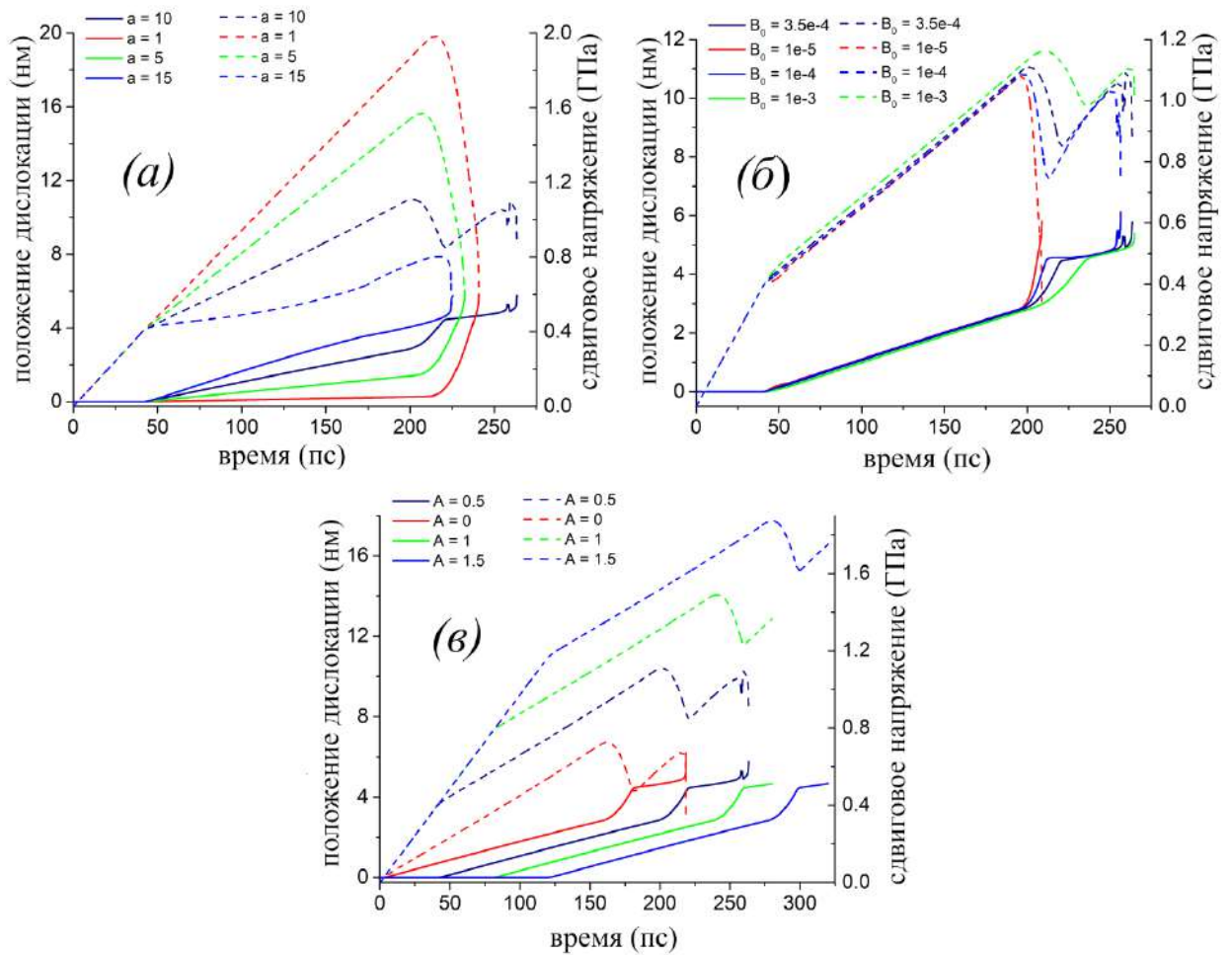


Рисунок 2.20. Результаты параметрического исследования теоретической модели (сплошные линии - положение дислокаций, пунктирные линии - средние напряжения сдвига; первые значения в легенде соответствуют параметрам, используемым в основной части работы): (а) влияние характерного размера области локализации a (в единицах величины вектора Бюргерса); (б) влияние коэффициента фононного трения B (в Па \times с); (в) влияние параметра упрочнения A (безразмерного), входящего в уравнение (2.13). Изменение параметров рассматривается в алюминиевом бикристалле с углом разориентировки 8.1° и скоростью сдвига 5 м/с.

Чтобы обеспечить хорошее соответствие результатов теоретической модели с расчетами МД для стадий движения II и III, в основной части работы используется коэффициент трения дислокации B в формуле (2.11) на

порядок выше, чем в случае движения уединенной полной дислокации в монокристалле, рассмотренном в работе [98]. Увеличение коэффициента трения при движении дислокационной стенки (ГЗ) можно объяснить следующим образом. Уединенная полная дислокация скользит в ГЦК монокристалле не как единая структура, а как пара частичных растянутых дислокаций Шокли с вектором Бюргерса полной дислокации даже в случае ГЦК алюминия, который имеет высокую энергию дефекта упаковки [98]. Противоположным образом, ГЗ движется как стенка полных краевых дислокаций в МД моделировании деформации сдвига бикристаллов (рисунки 2.5-2.8). В большинстве случаев расщепление на пары подвижных частичных дислокаций Шокли внутри дислокационных стенок отсутствует. Реакции расщепления здесь подавляются соседними зернограничными дислокациями, создающими разориентировку зерен бикристалла. Даже в случае дислокационных реакций (которые наблюдаются в бикристаллах меди и никеля) результатом является не пара частичных дислокаций Шокли, а неподвижные дислокационные сегменты. Известно, что скольжение пары частичных растянутых дислокаций Шокли является более энергетически выгодным в ГЦК кристаллах [2].

Еще один интересный результат, касающийся параметров движения дислокаций, заключается в том, что для всех трех исследованных металлов использовались одинаковые значения массы покоя m_0 и коэффициента трения B , что обеспечивают хорошее совпадение с результатами МД, несмотря на различие в энергиях дефекта упаковки данных металлов. С другой стороны, для случая движения уединенной дислокации в алюминии и меди [98, 105] массы покоя тоже совпадают, а коэффициенты трения различаются незначительно. Более того, зернограничные дислокации движутся в основном как полные дислокации, поэтому разница в энергиях дефекта упаковки не так важна для характеристики их движения.

Изменение параметра упрочнения A , рисунок 2.20(в), не меняет характера движения ГЗ или формы кривой сдвигового напряжения, но определяет момент и уровень напряжения для начала движения зернограницных дислокации: чем больше параметр A , тем дольше дислокации находятся в состоянии покоя на первом этапе движения, и тем большее значение напряжений необходимо для начала движения дислокаций.

2.6. Влияние дислокационных взаимодействий

В этом разделе сравниваются результаты полной теоретической модели движения ГЗ с упрощенной для того, чтобы оценить влияние междислокационных взаимодействий. В упрощенной модели используется приближение $F_D^{ij} = 0$ в формуле (2.10), а горизонтальное положение всех дислокаций внутри ГЗ совпадает - можно обозначить положение ГЗ как x_D для левой границы и $L - x_D$ для правой. Таким образом, решение уравнения движения (2.11) или (2.12) относительно одной координаты, определяет эволюцию системы в рамках упрощенной модели. Сила, действующая на ГЗ, вычисляется в зависимости от распределения локальных напряжений следующим образом:

$$F = b \langle \sigma_{xz} \rangle_{2a}, \quad (2.14)$$

$$\langle \sigma_{xz} \rangle_{2a} = \begin{cases} \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{H} \frac{x_D}{4a}, & x_D \leq a; \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{H} \frac{x_D}{4}, & a < x_D \leq L - a; \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{2H} \left(1 - \frac{L/2 - x_D}{2a} \right), & 2x_D > L - a. \end{cases} \quad (2.15)$$

Уравнение движения (2.11) или (2.12) решается с использованием силы F вместо F_f^i , определяемой уравнениями (2.14) и (2.15).

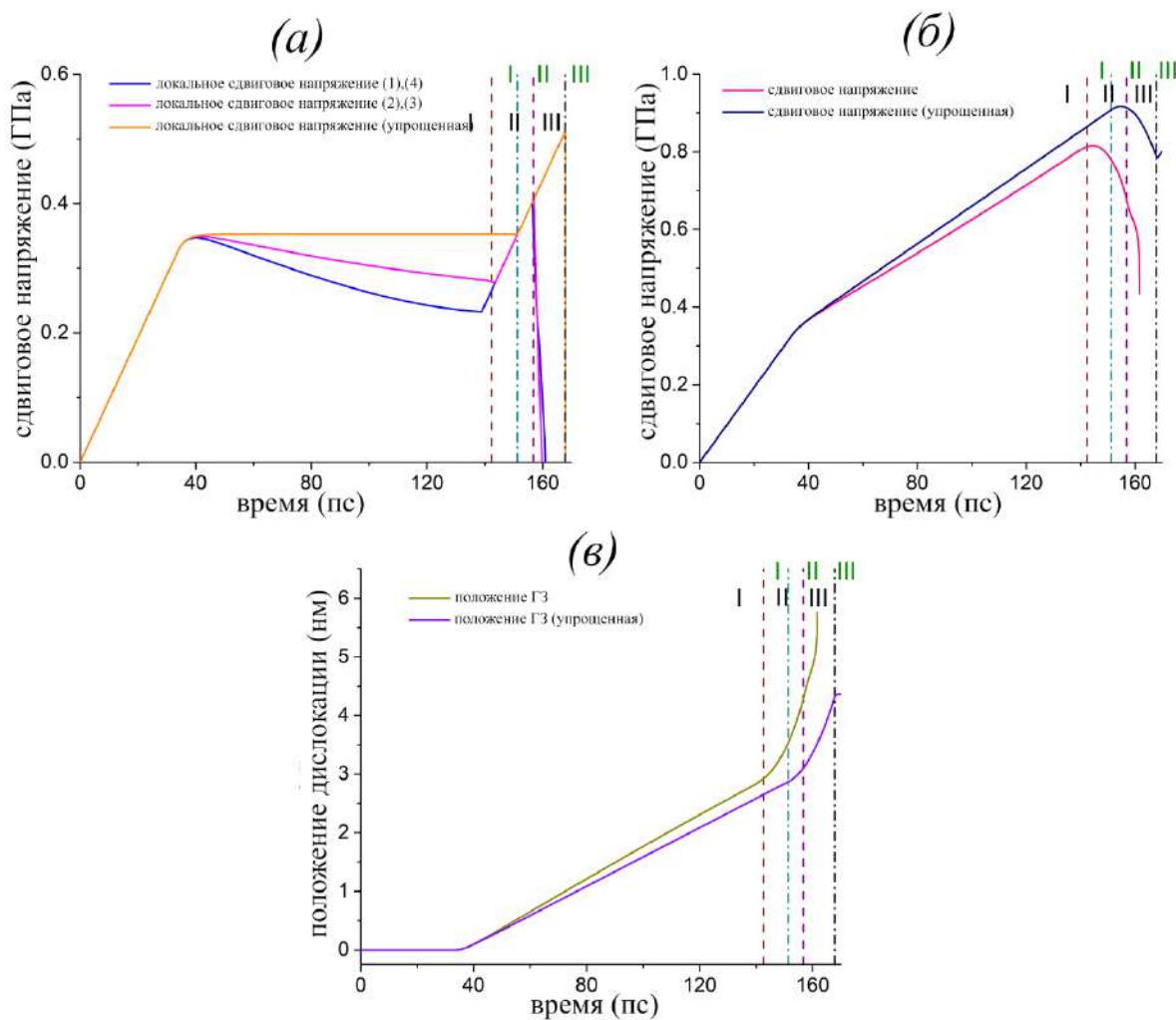


Рис. 2.21. Влияние междислокационных взаимодействий: сравнение полной теоретической модели движения малоугловой ГЗ наклона с упрощенной, в приближении нулевых междислокационных сил. Рассматривается случай бикристалла алюминия с углом разориентировки 4.5° и скоростью сдвига 5 м/с: локальное сдвиговое напряжение, действующее на зернограничные дислокации (а); среднее сдвиговое напряжение (б); положение ГЗ (в). Этапы движения обозначены следующим образом: линии пунктир-точка и зеленые цифры (I, II, III) относятся к упрощенной модели, в то время как пунктирная линия и черные цифры относятся к полной.

Междислокационное взаимодействие создает дополнительное притяжение между противоположными ГЗ, что обеспечивает более быстрое движение границ [рисунок 2.21(в)] при более низком уровне локальных напряжений [рисунок 2.21(а)] и средних напряжений [рисунок 2.21(б)] по сравнению со случаем упрощенной модели. Общее поведение системы похоже на стадиях I и II для обеих моделей, в то время как на стадии III дислокационные взаимодействия приводят к более быстрому сближению противоположных границ. В общем случае, упрощенную модель можно использовать для описания поведения системы на этапах I и II, до сближения противоположных ГЗ.

2.7. Влияние скорости деформации и размерные эффекты

С помощью теоретической модели исследовано влияние скорости деформации на упругопластическое деформирование бикристаллов алюминия с размерами зерен: 11.5 нм, 115 нм и 1.15 мкм. Наименьший исследуемый размер зерна соответствует типичному нанокристаллическому материалу, средний размер зерна находится на формальной границе между субмикрокристаллическими и нанокристаллическими материалами, а самый крупный размер соответствует микрокристаллическому материалу. Расчетные кривые напряжение-деформация показаны на рисунке 2.22 для различных скоростей деформации сдвига. Следует отметить, что в рамках данной модели, пластический отклик обеспечивается только за счет скольжения малоугловой ГЗ наклона вдоль направления сдвига без каких-либо альтернативных механизмов пластичности.

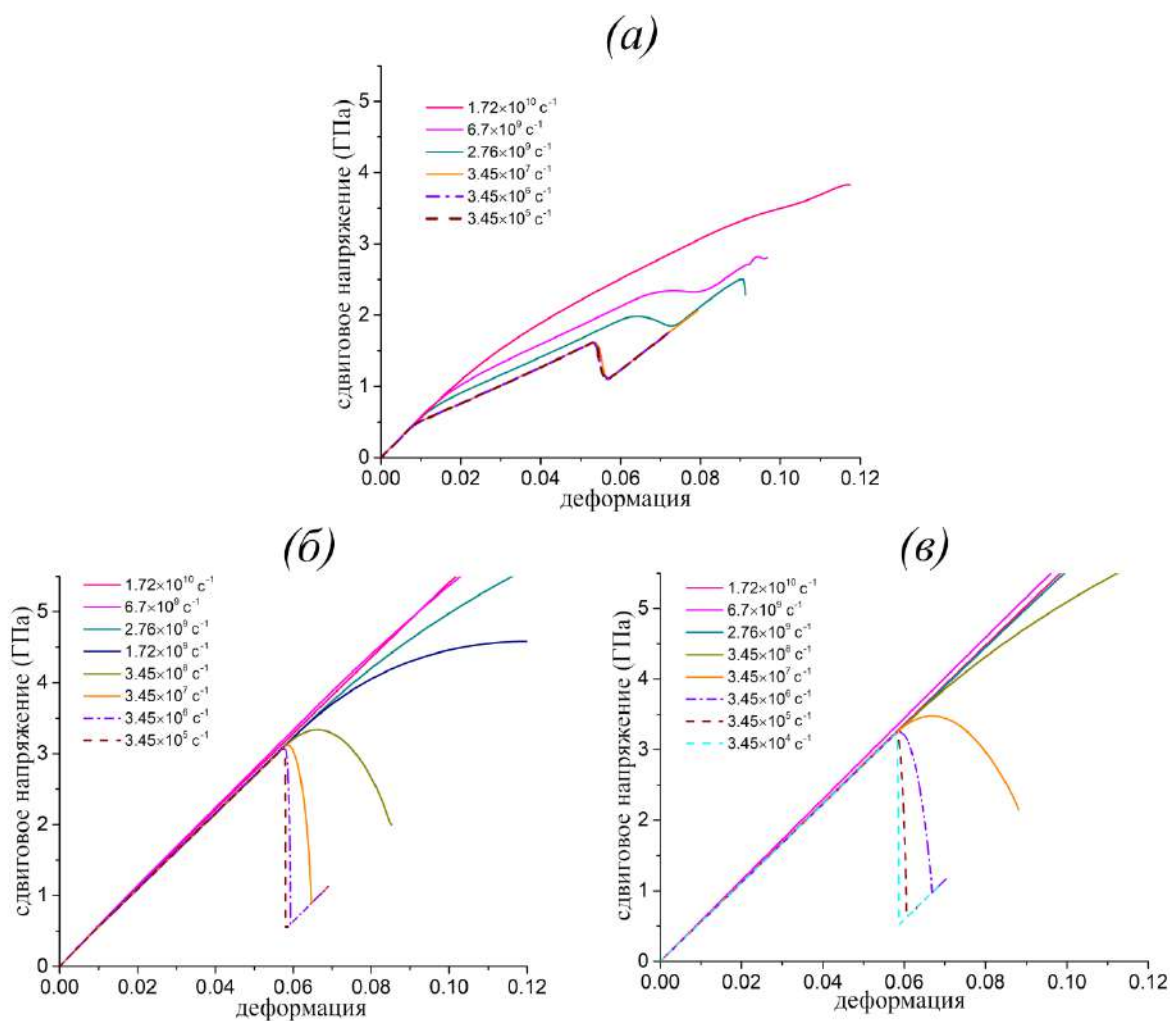


Рис. 2.22. Кривые напряжение-деформация при различных скоростях деформации сдвига для бикристаллов алюминия с углом разориентировки 12° и следующими размерами зерен: 11.5 нм (а), 115 нм (б) и 1.15 мкм (в).

Анализ кривых напряжение-деформация (рисунок 2.22) показывает, что при уменьшении скорости деформации возникает переход к квазистационарному режиму, когда дальнейшее уменьшение скорости деформации больше не влияет на отклик системы. Этот переход возникает для всех исследованных размеров зерен, но с увеличением размера зерна происходит уменьшение переходной скорости деформации. Для зерна размером 11.5 нм, отклик квазистационарен для скоростей деформации менее $\approx 3.5 \times 10^7 \text{ c}^{-1}$, для размера 115 нм менее чем $\approx 3.5 \times 10^6 \text{ c}^{-1}$, для размера зерна 1.15

мкм менее чем $\approx 3.5 \times 10^5 \text{ с}^{-1}$. Таким образом, переходная скорость деформации обратно пропорциональна размеру зерна, что вполне ожидаемо. Рисунок 2.22 также демонстрирует динамический режим деформации: увеличение скорости деформации выше переходного значения подавляет падение напряжений, связанное с началом II стадии движения ГЗ. При высоких скоростях деформации релаксация напряжений в результате движения ГЗ не оказывает существенного влияния на средние напряжения. Следует отметить, что скорости деформации в диапазоне $10^5 - 10^7 \text{ с}^{-1}$ характерны для ударно-волнового нагружения высокоскоростным ударом или интенсивным облучением.

На рисунке 2.23 сравнивается квазистационарный отклик для различных размеров зерна. Незначительная релаксация напряжений на этапе I характерна для двух больших кристаллов (размеры зерен 115 нм и 1.15 мкм), в отличие от самого маленького (размер зерна 11.5 нм). Максимальное смещение ГЗ на стадии I составляет $a \approx 3 \text{ нм}$, а объемная доля пластически деформированной области $a/L \approx 0.03$ для 115 нм и 0.003 для 1.15 мкм размеров зерна, соответственно. Для этих образцов пластическая релаксация с резким падением напряжения сдвига происходит на стадии II, когда ГЗ проходит через основной объем зерна. При этом локальное напряжение в окрестности ГЗ и, следовательно, приращение скорости ГЗ остаются почти постоянными, несмотря на резкое падение среднего напряжения. Этот результат отражает важность учета неоднородного распределения локальных напряжений в кристалле, что также обсуждалось в работе [98] для случая уединенной краевой дислокации. Для более крупных зерен условие квазистационарности означает, что приращение деформации мало во время движения ГЗ на стадии II. Если ГЗ движется со скоростью V через зерно размером L , время прохождения равно L/V , а накопленная деформация во время движения ГЗ равна $\Delta\varepsilon = \dot{\varepsilon}L/V$, где $\dot{\varepsilon}$ - скорость деформации.

Квазистационарный предел означает что $\Delta\varepsilon \ll 1$. Например, если $\Delta\varepsilon < 0.01$, то это приводит к $\dot{\varepsilon} < 0.01 V/L$, что совпадает с результатами теоретической модели при вполне разумном значении $V \approx 40$ м/с.

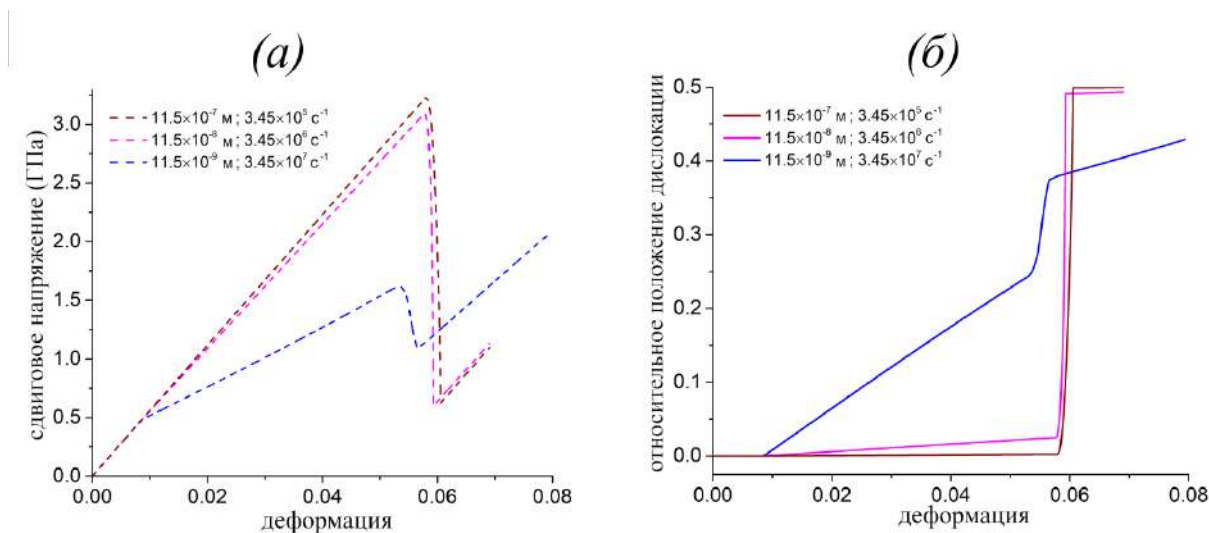


Рис. 2.23. Квазистационарный предел для разных размеров зерен: (а) кривые напряжение-деформация (б) и положение ГЗ в зависимости от деформации (как отношение текущего положения границы к начальному).

Выводы по второй главе

В данной главе исследуется движение малоугловых симметричных ГЗ наклона под действием сдвиговой деформации для случая, когда направление сдвига перпендикулярно ГЗ. Сформулирована теоретическая модель, которая описывает мобильность ГЗ как движение стенки полных краевых дислокаций. Теоретическая модель основана на данных МД моделирования деформации сдвига в бикристаллах меди, алюминия и никеля. Ниже приведены основные результаты, полученные в данной главе.

Движение малоугловой симметричной ГЗ наклона в ГЦК металлах можно представить как движение стенки периодически расположенных полных краевых дислокаций, что показывают результаты МД моделирования. Несмотря на то, что уединенная полная дислокация в ГЦК

кристаллах расщепляется на пару частичных дислокаций Шокли, зернограничные дислокации не проявляют этой тенденции. Данные МД моделирования показывают, что происходит значительная релаксация локальных сдвиговых напряжений в области за движущимися ГЗ, что учитывается в предлагаемой модели. В теоретической модели для каждой зернограничной дислокации решается уравнение движения, и учитываются междислокационные взаимодействия. В модели выделяется три основных этапа движения ГЗ возникающие из-за неравномерного распределения локальных сдвиговых напряжений. Конкретные характеристики этих стадий могут варьироваться в зависимости от скорости деформации и размера зерна. Модель показывает хорошее согласие с данными МД моделирования движения ГЗ. Учет междислокационных взаимодействий позволяет описать изменение формы ГЗ в теоретической модели, которое наблюдается также и в МД моделировании. С другой стороны, упрощенная модель без учета междислокационных взаимодействий адекватно описывает основные стадии движения ГЗ, за исключением стадии, где происходит сближение противоположных ГЗ, и взаимодействие дислокаций начинает играть основную роль.

Предлагаемая теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона соответствует положению № 1 выносимому на защиту.

Исследование влияния скорости деформации и размера зерна в теоретической модели показывает, что движение ГЗ на II стадии, когда приращение локальных напряжений вокруг зернограничных дислокаций постоянно, приводит к быстрому перемещению ГЗ и резкому падению средних напряжений в системе. Это особенно хорошо наблюдается для размеров зерен больше 100 нм в квазистатическом режиме деформации.

Данные результаты теоретической модели соответствуют положению № 2 выносимому на защиту.

Если нормаль ГЗ наклонена от направления сдвига, то может возникнуть неустойчивость движения зернограничных дислокаций, приводящая к распаду стенки дислокаций. В этом случае ГЗ гофрируется еще до начала деформации: часть дислокаций перемещается внутрь одного из зерен, а другая часть - в противоположном направлении. Во время деформации сдвига, расстояние между двумя частями дислокаций только возрастает за счет отталкивания между дислокациями одного знака.

В теоретической модели пороговое напряжение начала движения ГЗ определяются членом, который зависит от плотности дислокаций в системе. Хотя в модели явно рассчитываются междислокационные силы для ближайших ГЗ, в МД моделировании количество взаимодействующих ГЗ фактически бесконечно из-за периодических граничных условий. Поэтому для сравнения результатов теоретической модели и МД моделирования необходимо учитывать взаимодействия между периодическими ГЗ. Рассчитанный по теоретической модели момент начала движения совпадает с МД данными для большинства рассмотренных бикристаллов, что подтверждает справедливость этого критерия.

Глава 3. Движение уединенной краевой дислокации и малоугловой симметричной границы зерна наклона (110) в твердом растворе атомов меди

В первой части настоящей главы проводится МД исследование взаимодействия уединенной краевой дислокации с твердым раствором атомов меди различной концентрации (до 1%) в алюминиевом монокристалле при нормальной температуре. Во второй части главы формулируется теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона в твердом растворе атомов меди в алюминиевом бикристалле (2% и 5%) при нормальной температуре. Модель использует полученные в МД исследовании представления о движении, как уединенной краевой дислокации, так и малоугловых ГЗ наклона в твердом растворе атомов меди в алюминиевой матрице.

3.1. Движение уединенной краевой дислокации в твердом растворе атомов меди в монокристалле алюминия

3.1.1. Молекулярно-динамическое моделирование движения дислокации в твердом растворе атомов меди

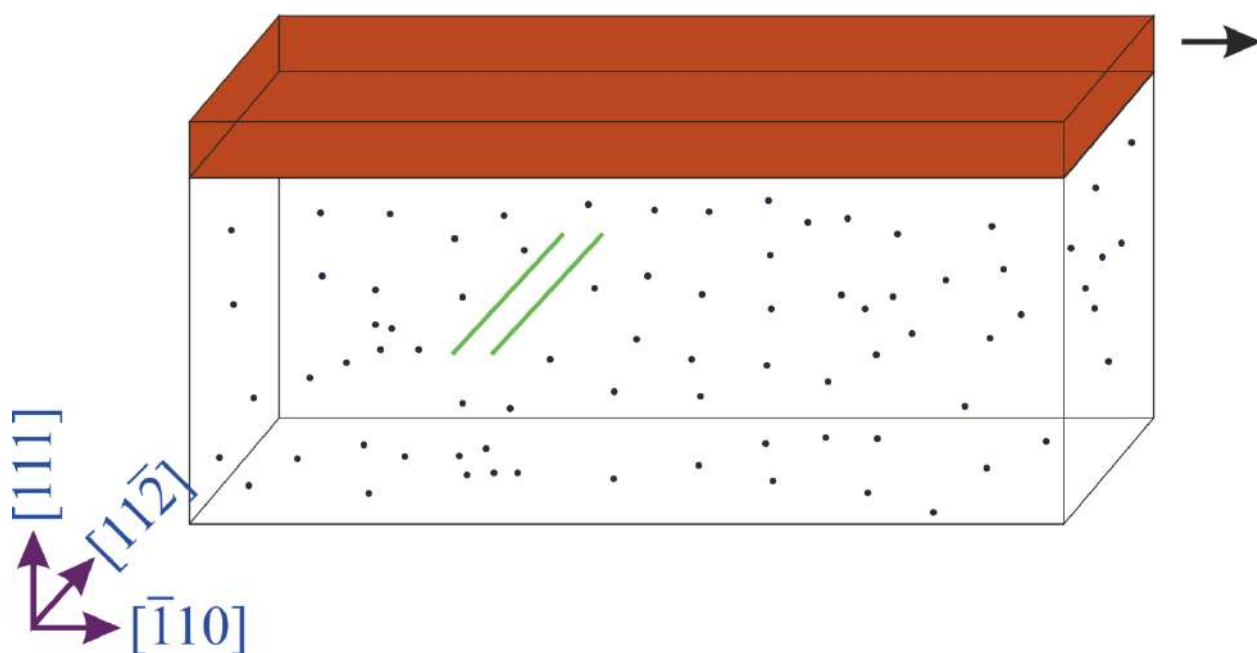


Рис. 3.1. Схема моделирования сдвиговой деформации монокристалла алюминия с твердым раствором атомов меди и краевой дислокацией: синие кружки - атомы меди; две зеленые линии - частичные дислокации Шокли (ведущая и замыкающая); красный параллелепипед - часть кристалла, которая двигается с постоянной скоростью в направлении, указанной стрелкой.

Постановка данного МД моделирования подобна той, что использовалась для движения малоугловых ГЗ наклона в чистых ГЦК бикристаллах (раздел 2.2). Однако в этом случае атомные взаимодействия определяются потенциалом с угловой завистью (ADP) для алюминия и меди [150]. Описание взаимодействий Al-Al и Cu-Cu в этом потенциале ранее было сформулировано авторами для формализма EAM, и было показано, что

эти два потенциала хорошо воспроизводят упругие постоянные и энергию различных дефектов, как для алюминия, так и для меди [144, 145]. Потенциал с угловой зависимостью дополнительно учитывает энергию нецентральных атомных взаимодействий, которые вводятся через дипольные и квадрупольные слагаемые в общую энергию. Эти члены учитывают искажения решетки из-за кубической структуры, которые могут возникать локально при замене атома алюминия на атом меди в твердых фазах в системе алюминий-медь. Авторы [150] показали, что потенциал ADP хорошо воспроизводит параметры решетки, энергии образования дефектов и упругие постоянные основных фаз упрочнения в системе Al-Cu, такие, как θ и θ' фазы. Этот потенциал ранее использовался в МД исследовании упрочнения сплава Al-Cu как в случае ГП зон [52], так и в случае θ' фазы [105]. На данный момент этот потенциал является одним из лучших классических потенциалов, которые широко используются в МД моделировании, несмотря на развитие более точных потенциалов машинного обучения [151].

Перейдем к реализации МД моделирования (рисунок 3.1). Первый шаг – создание МД моделей кристалла: в монокристалле алюминия объемом $52 \times 60 \times 15$ нм³ и осями системы, ориентированными вдоль кристаллографических направлений $[\bar{1}10]$, $[111]$, $[11\bar{2}]$, выбираются случайным образом атомы алюминия, затем удаляются и заменяются атомами меди. Такая схема ориентации осей в МД системе обычно используется в исследовании движения дислокаций [139]. Исследовались образцы с концентрацией медных атомов 0.25, 0.5 и 1 ат.%. После предыдущих этапов, в центре кристалла создается краевая дислокация [116]. Второй шаг - нагрев и релаксация напряжений в кристалле. МД модель кристалла нагревается до $T = 300$ К с помощью термостата Нозе-Гувера, а напряжения в системе поддерживаются с помощью баростата Нозе-Гувера в течение 10 пс с независимой релаксацией компонент тензора напряжений σ_{xx} ,

σ_{yy} , σ_{zz} . После релаксации, система подвергается сдвиговой деформации: верхний слой кристалла толщиной 3 нм перемещается с постоянной скоростью 3 м/с, а нижний слой такой же толщины остается неподвижным. Температура системы в процессе деформации поддерживается на уровне $T = 300$ К с помощью термостата Нозе – Гувера. Периодические граничные условия используются по осям X , Z для устранения граничных эффектов во время моделирования.

3.1.2. Взаимодействие движущейся краевой дислокации с атомами меди

Краевая дислокация начинает двигаться в кристалле алюминия вдоль оси X в процессе пластической деформации и взаимодействует с множеством атомов меди на своем пути. Атомы меди расположены случайным образом в алюминиевой матрице - это означает, что есть зоны с высокой и низкой концентрацией данных атомов. Зоны с высокой концентрацией (ЗВК) являются основными препятствиями для движущейся дислокации, и в дальнейшем исследование сосредоточено в основном на них. Если дислокация останавливается при встрече с ЗВК, то сегмент этой дислокации обычно переходит на соседнюю плоскость скольжения, чтобы обойти препятствие. Затем дислокация проходит препятствие, и сегмент дислокации возвращается в исходную плоскость скольжения. Во время этого процесса в кристалле испускаются вакансии - рисунок 3.2.

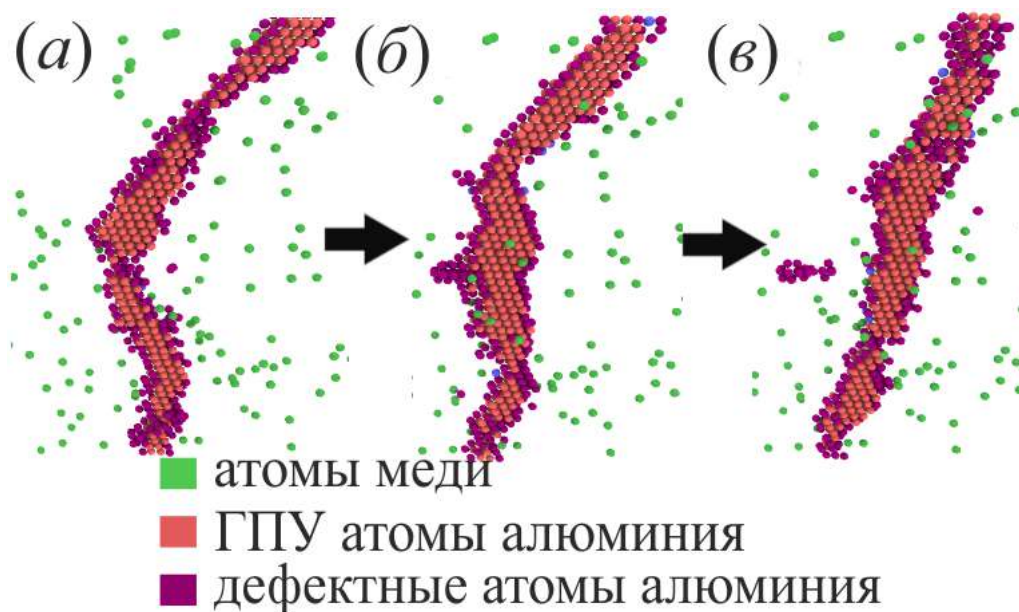


Рис. 3.2. Образование вакансий при взаимодействии дислокации с растворенными атомами меди. Дислокационный сегмент уходит на соседнюю плоскость скольжения (а), этот же сегмент возвращается на основную плоскость скольжения (б), образование вакансии в кристалле после дислокационного перехода (в).

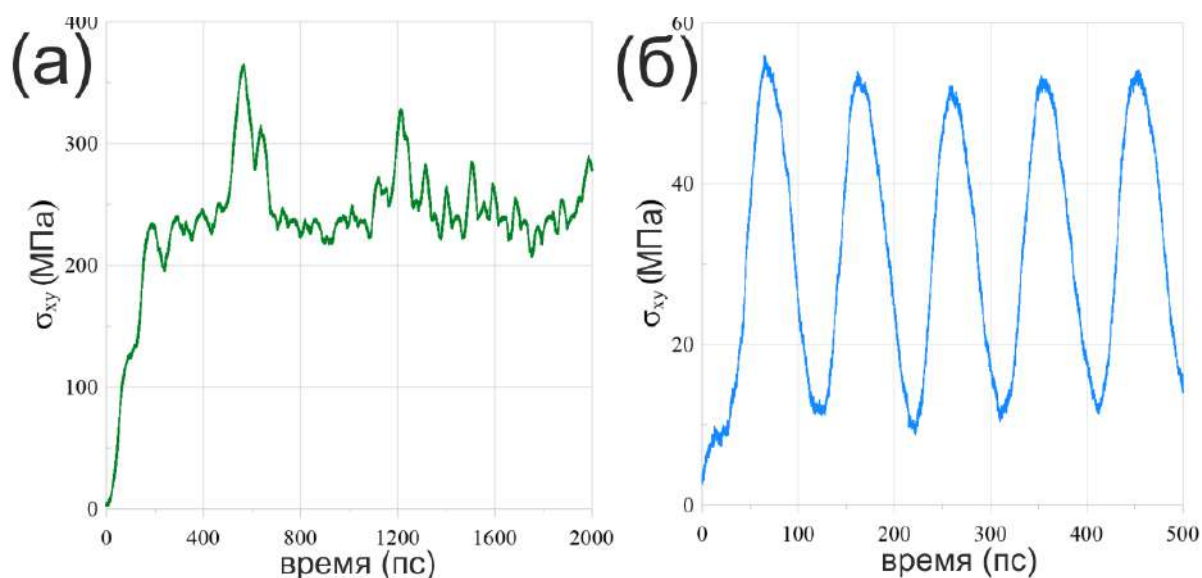


Рис. 3.3. Зависимость напряжения сдвига от времени деформации в твердом растворе меди с концентрацией атомов меди 0.5% (а) и в чистом алюминии (б).

Движение краевой дислокации при наличии множества препятствий приводит к значительному увеличению сдвиговых напряжений в системе по сравнению с движением дислокации в чистом алюминии (рисунок 3.3). В чистом алюминии после начального ускорения, дислокация движется с почти постоянной скоростью – возникают малые колебания около среднего значения ≈ 30 МПа - рисунок 3.3(б). Такие колебания можно объяснить последовательными прохождением дислокации через периодические границы в след своего предыдущего скольжения, что было показано в работе [98]. Средний уровень сдвиговых напряжений в случае твердого раствора меди составляет ≈ 250 МПа. Такое высокое значение связано с ограничением скорости дислокации из-за постоянного взаимодействия с растворенными атомами меди.

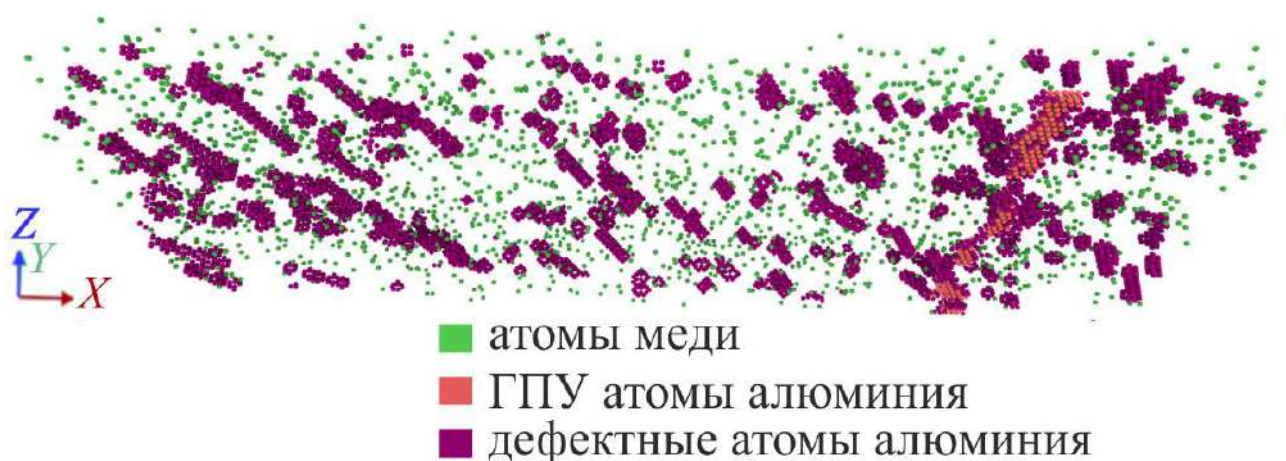


Рис. 3.4. Движение краевой дислокации в твердом растворе атомов меди в алюминиевом монокристалле с концентрацией атомов меди равной 1 %.

Дислокация может полностью перейти в соседнюю плоскость скольжения в случае высокой концентрации атомов меди в алюминиевой матрице. На рисунке 3.4 показана дислокация, которая смещена на несколько соседних плоскостей скольжения от своей начальной позиции в образце с наибольшей из рассмотренных концентрацией атомов меди, равной 1 ат. %. В этом кристалле находится множество вакансий на каждой плоскости

скольжения, в которой находилась эта дислокация. Это означает, что дислокация не сразу уходит на другую плоскость скольжения, а некоторое время перемещается по каждой из плоскостей и преодолевает ЗВК.

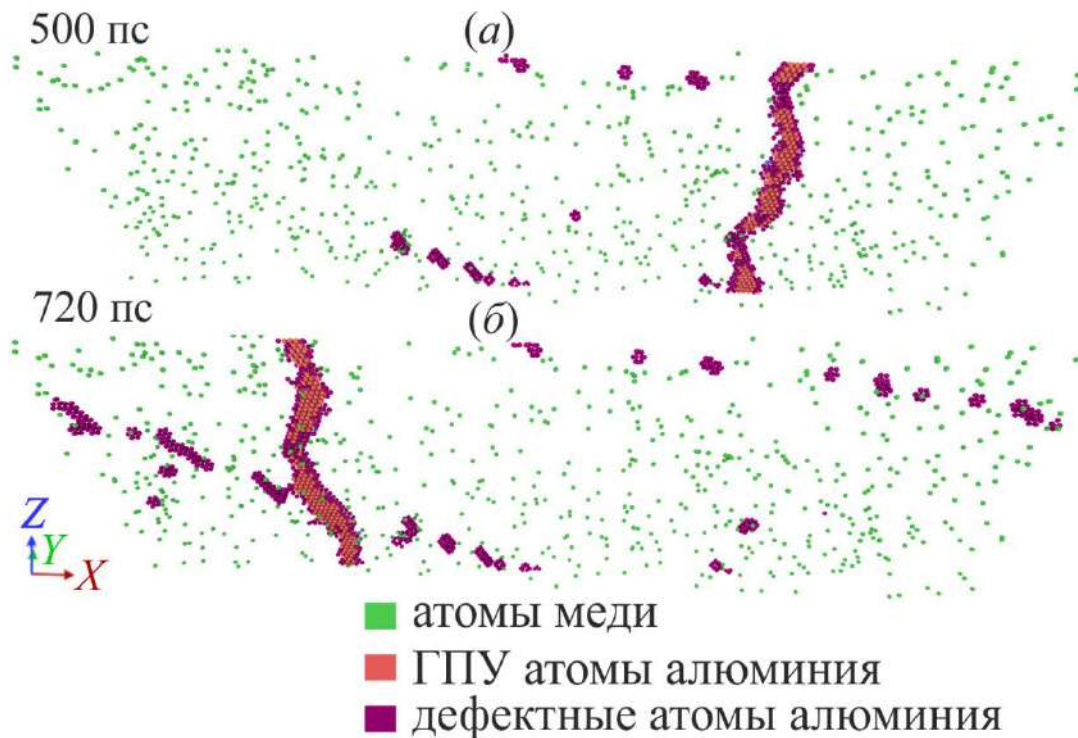


Рис. 3.5. Краевая дислокация до (а) и после (б) полного перехода в соседнюю плоскость скольжения в кристалле алюминия с твердым раствором меди с концентрацией атомов меди 0.5 %.

Рассмотрим подробнее процесс полного перехода дислокации в соседнюю плоскость скольжения. На временной зависимости напряжения сдвига σ_{xy} есть два максимума, соответствующие временам моделирования 600 и 1200 пс - рисунок 3.3(а). Эти вершины соответствуют полному переходу дислокации в соседнюю плоскость. Проанализируем первый максимум: дислокация находится в начальной плоскости скольжения, пока напряжение сдвига увеличивается до максимального значения ≈ 350 МПа (примерно при 500 пс) - в этот момент дислокация взаимодействует с ЗВК [рисунок 3.5(а)]. Это взаимодействие фиксирует дислокацию на одном месте

в течение ≈ 100 пс. Торможение дислокации на этот интервал времени вызывает увеличение напряжения сдвига, что стимулирует выброс дислокационного сегмента в соседнюю плоскость скольжения и позволяет дислокации преодолеть препятствие [рисунок 3.5(б)]. Как упоминалось выше, образование вакансий связано с переходом дислокационного сегмента между соседними плоскостями скольжения, и этот факт показывает, что дислокация претерпевает множество неполных переходов, прежде чем полностью перейдет в соседнюю плоскость скольжения. К моменту времени 720 пс дислокация совершает полный переход. Аналогичная ситуация происходит в случае пика на кривой напряжения при 1200 пс.

3.1.3. Напряженное состояние в монокристалле алюминия с твердым раствором меди и краевой дислокацией

В данном разделе анализируется пространственное распределение локальных сдвиговых напряжений в кристалле. Построение карт локальных напряжений обсуждалось в разделе 2.3.

Начальное распределение локальных напряжений сдвига представлено на рисунке 3.6(а): дислокация имеет собственное поле напряжений, но также влияет и на напряженное состояние всей системы. Развитие пластической деформации приводит к образованию распределения локальных напряжений, в периоде между дислокационными переходами, близкого к исходному - рисунок 3.6(б). Однако полные сдвиговые напряжения в системе [рисунок 3.3(а)] все же имеют особенность: первоначально их значение быстро увеличивается, но примерно через 400 пс начинаются колебания в пределах диапазона 250–270 МПа (если не учитывать большие пики на кривой напряжения сдвига, вызванные дислокационными переходами). Это означает, что система переходит в стационарное состояние.

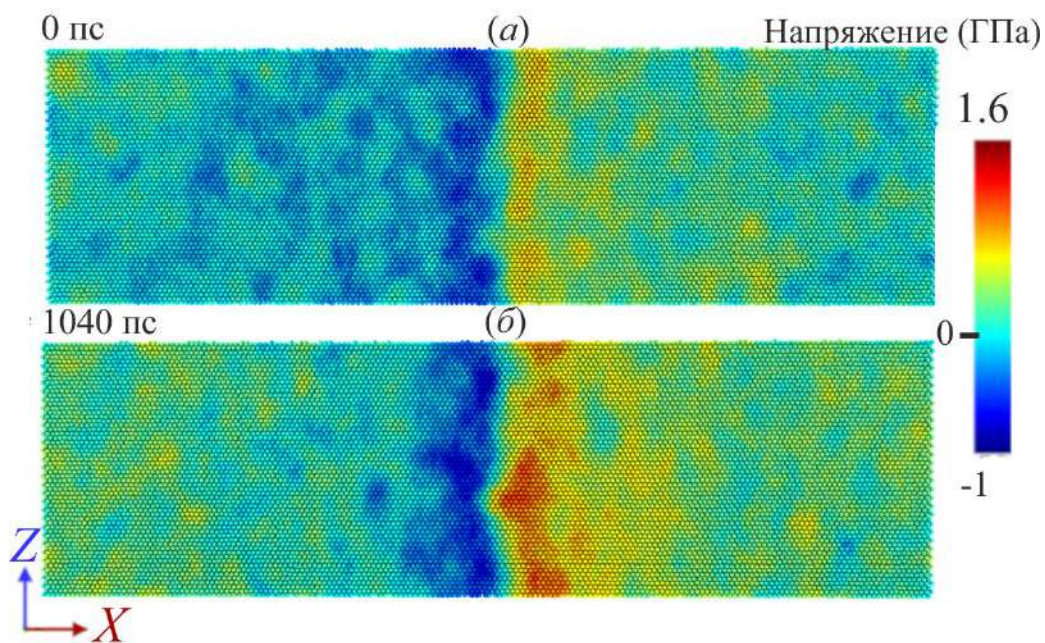


Рис. 3.6. Карта локальных сдвиговых напряжений σ_{xy} в начале деформации (а) и между полными дислокационными переходами (б).

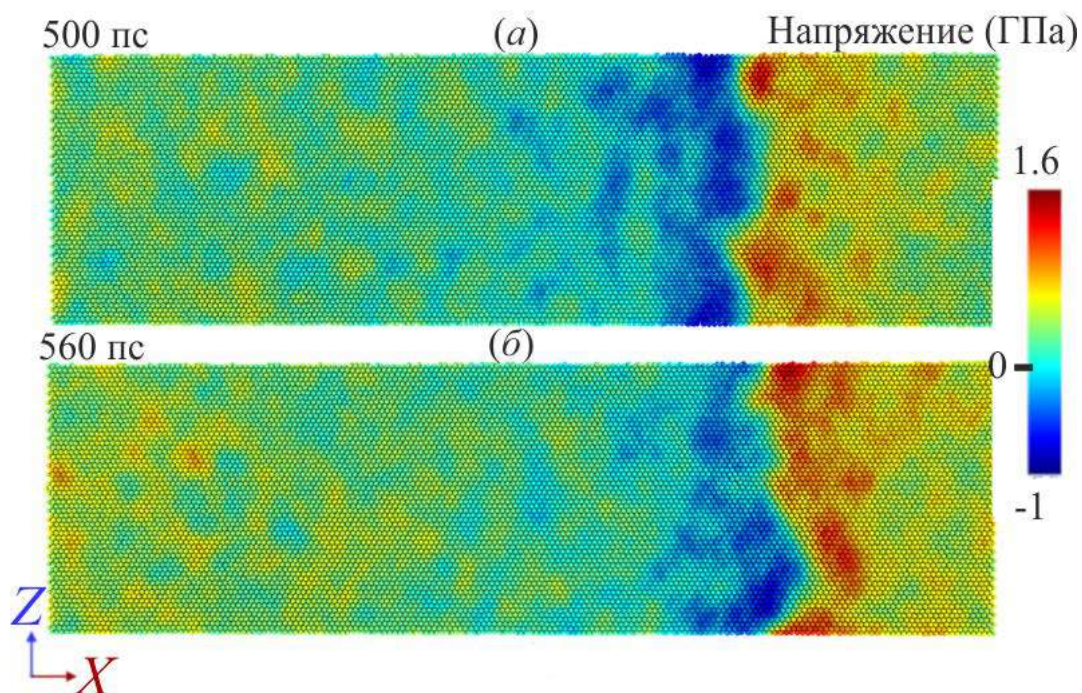


Рис. 3.7. Карта локальных сдвиговых напряжений σ_{xy} в начале дислокационного перехода в соседнюю плоскость скольжения (а) и в момент, предшествующий полному переходу (б).

Как отмечалось в разделе 3.1.2, сдвиговые напряжения накапливаются в кристалле перед тем, как краевая дислокация уходит в соседнюю плоскость скольжения. На рисунке 3.7 показано распределение локальных напряжений в процессе данного перехода - большая величина локальных сдвиговых напряжений возникает в области справа от дислокации, когда дислокация испытывает торможение при взаимодействии с ЗВК. Примерно через 60 пс дислокация снова начинает движение, и значения сдвиговых напряжений снижается - рисунок 3.7(б). Можно предположить, что полный переход краевой дислокации в соседнюю плоскость является пороговым эффектом, который зависит от определенного значения локальных напряжений сдвига в области справа от дислокации.

3.2. Движение малоугловой границы зерна наклона (110) в твердом растворе атомов меди в бикристалле алюминия

3.2.1. Постановка теоретической модели и молекулярно-динамического моделирования движения границ зерен в твердом растворе атомов меди

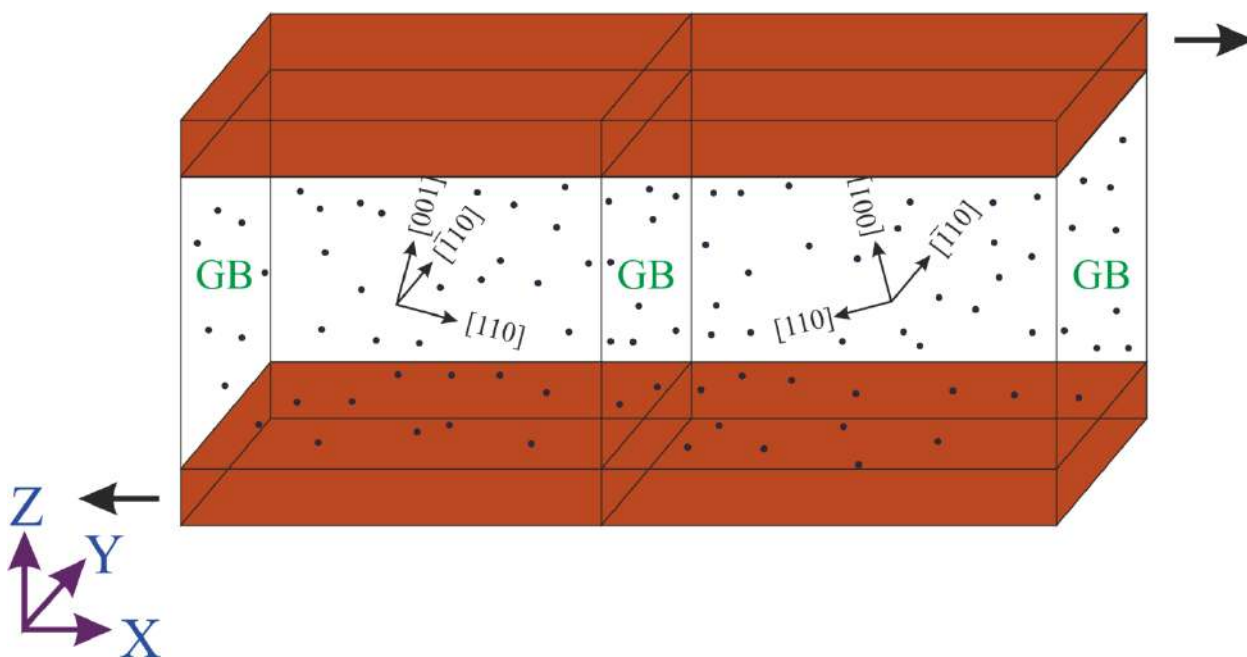


Рис. 3.8. Реализация сдвиговой деформации алюминиевого бикристалла с твердым раствором атомов меди: в областях, отмеченным красным цветом, атомам придается равномерная скорость, а остальная часть кристалла (без цветового обозначения) - область для исследования движения ГЗ; синие кружки представляют собой растворенные атомы меди.

Постановка МД моделирования сдвиговой деформации бикристалла алюминия с твердым раствором атомов меди аналогична описанной в разделе 2.2 для бикристаллов из чистых ГЦК металлов. Разница заключается только в создании МД системы: после создания бикристалла чистого ГЦК алюминия, часть алюминиевых атомов, выбранных случайным образом, заменяются атомами меди. Рассмотрены концентрации атомов меди 2 и 5 %. Схема деформации МД системы приведена на рисунке 3.8.

Теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона в твердом растворе атомов меди в алюминиевом кристалле построена на основе модели движения ГЗ в чистых ГЦК металлах, которая сформулирована в разделе 2.1. Для рассматриваемого случая варьировались 3 параметра, значения которых приведены в таблице 3.1. Увеличение значения модуля сдвига G с ростом

концентрации твердого раствора производилось в соответствии с экспериментальными данными [152]. Область локализации напряжений вокруг дислокации в кристалле, определяются через параметр a/b – в случае кристалла с твердым раствором наблюдается уменьшение этой области, что связано с постоянным взаимодействием дислокации и твердого раствора, которое ведет к более компактному распределению избыточных напряжений вокруг линии дислокации (рисунки 3.6-3.7). Увеличение предела текучести Y_0 также связано с наличием твердого раствора – в разделе 3.1.3 описано, что при движении уединенной краевой дислокации в твердом растворе уровень напряжений увеличивается в несколько раз, рисунок 3.3(б), даже для концентрации 0.5% атомов меди. В законе упрочнения (2.13) Y_0 отвечает, в том числе, за сопротивление со стороны дефектов кристаллической структуры, соответственно, увеличение значения этого члена закономерно.

Таблица 3.1. Часть параметров теоретической модели, описанной в разделе 2.1, которые были изменены для моделирования движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в кристалле алюминия с твердым раствором атомов меди.

Параметры	Концентрация Cu - 2%	Концентрация Cu - 5%
a/b	9	9
G (Па)	$32 \cdot 10^9$	$35 \cdot 10^9$
Y_0 (Па)	$500 \cdot 10^6$	$1500 \cdot 10^6$

3.2.2. Результаты теоретического и молекулярно-динамического моделирования движения границ в твердом растворе атомов меди

В результатах МД моделирования сдвиговой деформации бикристаллов алюминия с твердым раствором атомов меди наблюдается изменение формы ГЗ связанное с междислокационными взаимодействиями и неоднородным распределением сдвиговых напряжений в кристалле, как для

2% твердого раствора (рисунки 3.9, 3.11), так и для 5% (рисунки 3.10, 3.12). Это аналогично случаю чистых ГЦК металлов, описанному в разделе 2.3. После начала движения ГЗ центральные дислокации выходят вперед, что происходит как в МД моделировании, так и в теоретической модели, где явно рассчитываются междислокационные взаимодействия. Во время дальнейшего сближения противоположных ГЗ, крайние дислокации выходят вперед, что приводит к повторному изменению формы границы [рисунки 3.9(г), 3.11(г), 3.12(г)]. То есть, основные стадии движения, описанные для чистых ГЦК металлов, сохраняются и в случае бикристалла с твердым раствором, как в МД моделировании, так и в теоретической модели. 0 стадия – ГЗ находятся в покое, так как действующее напряжение ниже порогового значения $\gamma/2$. I стадия - зернограничные дислокации начинают двигаться, область отрелаксированных напряжений за движущимися дислокациями растет (рисунок 2.1), и локальные напряжения начинают уменьшаться, несмотря на продолжающийся рост, как деформации сдвига, так и напряжений в пластически недеформированной области. Сила со стороны зернограничных дислокаций становится больше именно для центральных дислокаций, соответственно, центральные дислокации в каждой ГЗ на этой стадии выходят вперед. II стадия – происходит увеличение скорости движения ГЗ за счет того, что область отрелаксированных напряжений вокруг дислокаций перестает увеличиваться, и локальные напряжения сдвига начинают быстро расти. III стадия – зернограничные дислокации из противоположной ГЗ со своей областью отрелаксированных напряжений попадают в область локализации рассматриваемой ГЗ, и локальные напряжения резко падают, а сила междислокационных взаимодействий быстро растет. Сила взаимодействия между дислокациями на краях системы становится больше, чем для центральных дислокаций и происходит изгиб границы противоположным образом - это изменение связано с тем, что

согласно формуле (2.8), сила взаимодействия дислокаций меняет знак, когда вертикальное расстояние между дислокациями превышает горизонтальное.

С другой стороны, наличие растворенных атомов меди в алюминиевом кристалле мешает продвижению дислокации, поэтому искривление формы границы и её скорость зависят от взаимодействий дислокаций с атомами меди (что более подробно описано в разделе 3.1). На рисунке 3.10(г) наблюдается несоответствие между данными теоретической модели и МД результатами. Зернограничные дислокации в МД моделировании перестают двигаться как единая структура – нижняя дислокация “зацепляется” за растворенные атомы меди и не продвигается дальше [начиная с рисунка 3.10(б) и включительно до рисунка 3.10(г)], тогда как остальные зернограничные дислокации продолжают движение. Это несколько нарушает картину движения ГЗ, представленную в теоретической модели, однако напряженное состояние системы описывается достаточно хорошо [рисунок 3.15(в)].

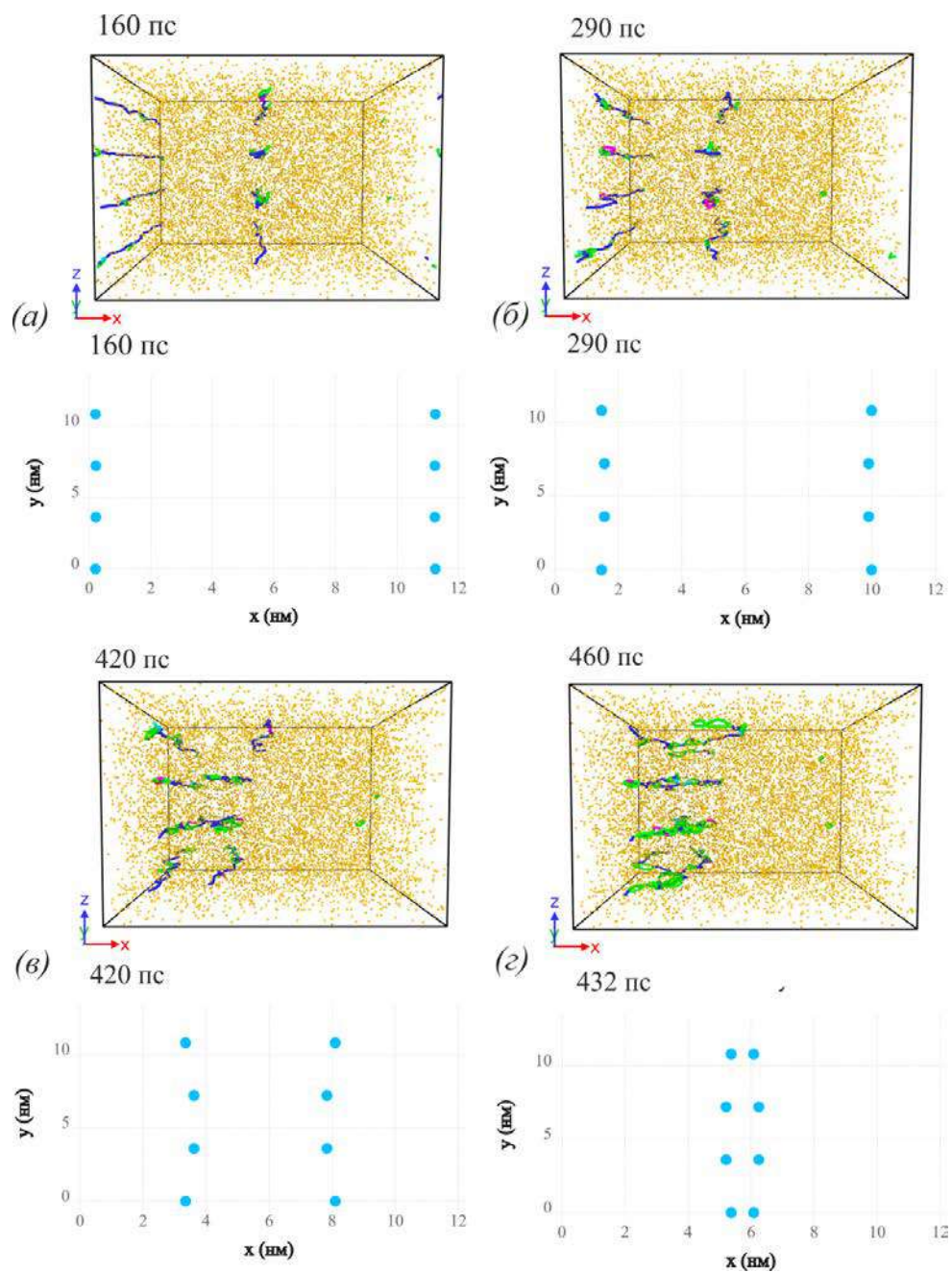


Рис. 3.9. Положения зернограничных дислокаций, полученные из МД моделирования (верхние графики) и рассчитанные с помощью теоретической модели (нижние графики), в различные моменты времени для случая бикристалла алюминия с 2% твердым раствором атомов меди, углом разориентировки 4.5° и скоростью сдвига 2 м/с: (а) выход ГЗ из 0 стадии движения и начало искривления формы ГЗ с выходом центральных дислокаций вперед; (б) продолжение движения ГЗ в I фазе, искривление

границы становится более выраженным как в МД, так и в модели; (в) резкое ускорение ГЗ за счет перехода во II фазу движения; (г) ГЗ в III фазе движения, форма границы искривляется противоположным образом.

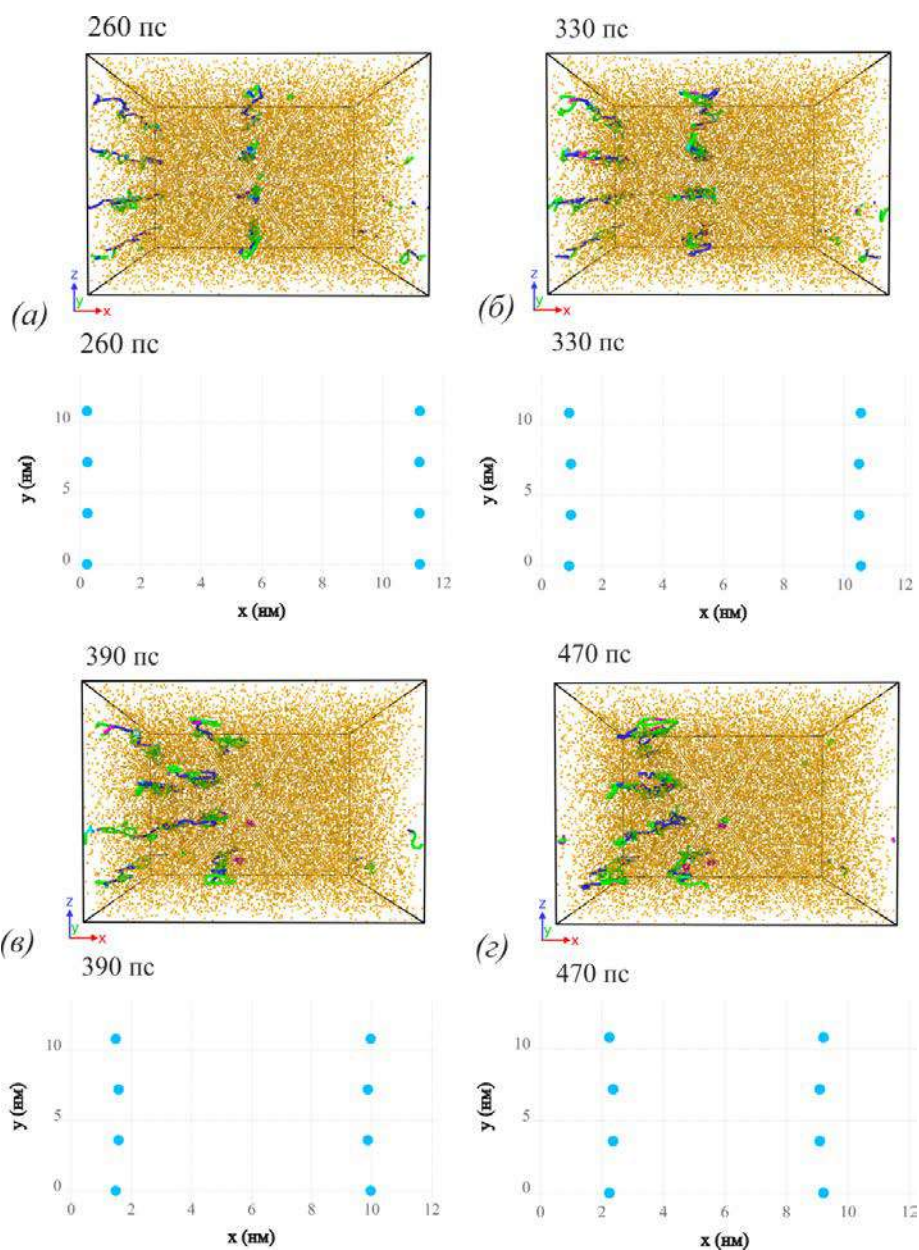


Рис. 3.10. Положения зернограничных дислокаций, полученные из МД моделирования (верхние графики) и рассчитанные с помощью теоретической модели (нижние графики), в различные моменты времени для случая бикристалла алюминия с 5% твердым раствором атомов меди, углом разориентировки 4.5° и скоростью сдвига 2 м/с: (а) выход ГЗ из 0 стадии

движения; (б) продолжение движения ГЗ в I фазе, искривление границы; (в) резкое ускорение ГЗ за счет перехода во II фазу движения, начало отклонения между данными МД и результатами теоретической модели; (г) развитие отклонения в результатах – в МД все дислокации, кроме нижней, уже контактируют, тогда, как модель не предсказывает такого сближения дислокаций.

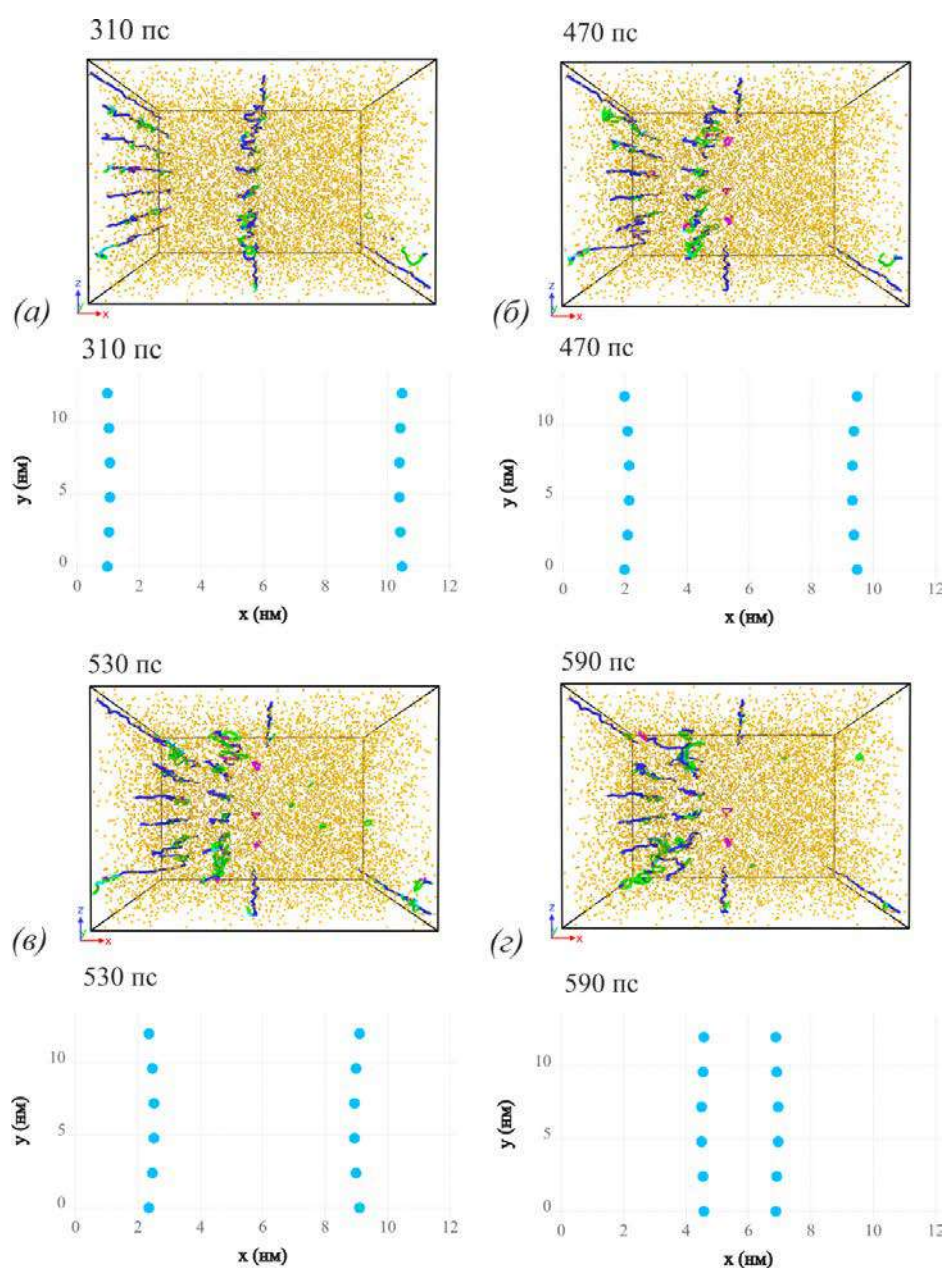


Рис. 3.11. Положения зернограничных дислокаций, полученные из МД моделирования (верхние графики) и рассчитанные с помощью теоретической

модели (нижние графики), в различные моменты времени для случая бикристалла алюминия с 2% твердым раствором атомов меди, углом разориентировки 8.1° и скоростью сдвига 2 м/с: (а) начало движения ГЗ в I фазе; (б) продолжение движения ГЗ в I фазе с более явным искривлением фронта границы; (в) начало перехода во II стадию движения; (г) переход в III стадию движения с искривлением границы в противоположную сторону.

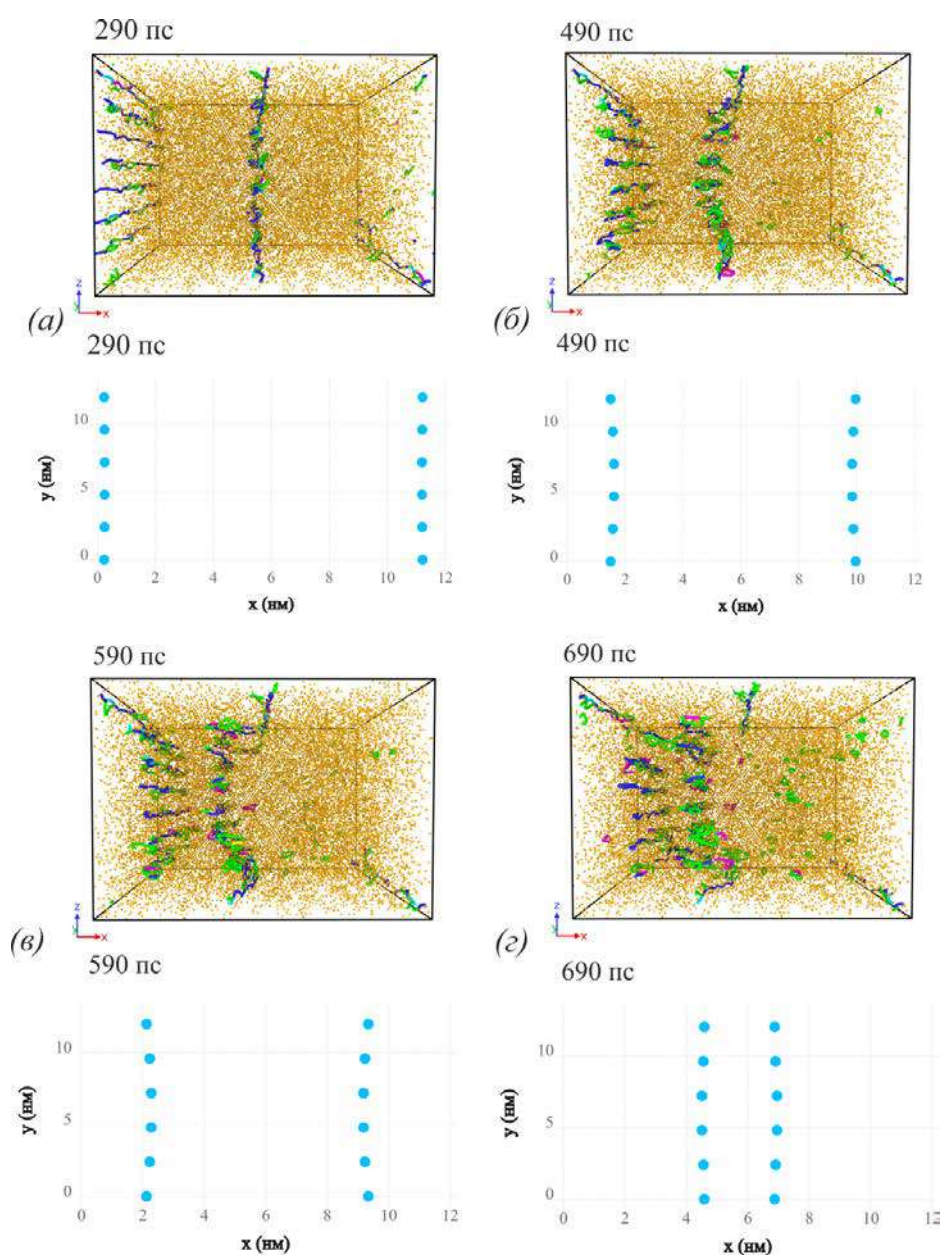


Рис. 3.12. Положения зернограничных дислокаций, полученные из МД моделирования (верхние графики) и рассчитанные с помощью теоретической

модели (нижние графики), в различные моменты времени для случая бикристалла алюминия с 5% твердым раствором атомов меди, углом разориентировки 8.1° и скоростью сдвига 2 м/с: (а) начало движения границы в I фазе; (б) продолжение движения ГЗ в I фазе с более явным искривлением фронта границы; (в) начало перехода во II стадию движения; (г) переход в III стадию движения с искривлением границы в противоположную сторону.

Результаты МД моделирования и теоретической модели показывают хорошее количественное соответствие на примере кривых сдвигового напряжения и среднего положения границы (рисунки 3.13-3.18). Лучшее согласие показывают результаты для бикристалла алюминия с углом разориентировки 4.5° и концентрацией меди 2% (рисунок 3.14), что можно объяснить, во-первых, малым числом дислокаций, во-вторых, малым содержанием твердого раствора. Результаты МД моделирования в этом случае становятся ближе к результатам, полученным для чистых ГЦК металлов. С другой стороны, при большом числе дислокаций и/или большей концентрации твердого раствора (рисунки 3.15-3.18) наблюдается большее расхождение между МД данными и результатами теоретической модели.

В отличие от теоретической модели, в результатах МД не наблюдается сильного падения напряжений. На рисунках 3.9–3.12, где представлены результаты МД моделирования, видно, что даже в близком контакте ГЗ быстрой аннигиляции зернограницных дислокаций не происходит – это связано с наличием твердого раствора в кристалле. Часть дислокации зацепляется за растворенные атомы меди, что препятствует дальнейшему продвижению и аннигиляции дислокаций из противоположных ГЗ. Также, среднее положение границы в ряде случаев показывает отклонение между данными МД и теоретической моделью – рисунки 3.15, 3.16, 3.18. Учитывая,

что часть дислокаций закрепляется твердым раствором, оценка среднего положения границы алгоритмом ДХА в этих случаях не очень точна.

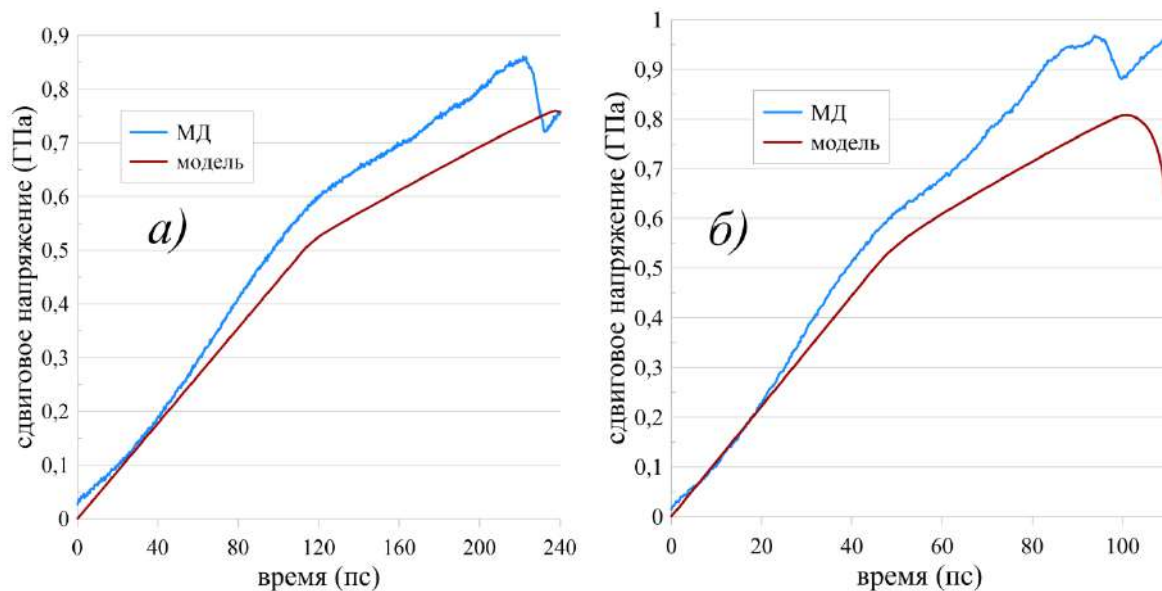


Рис. 3.13. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в бикристалле алюминия с 2% твердым раствором атомов меди и углом разориентировки 2° при перпендикулярном сдвиге: (а) скорость сдвига 2 м/с; (б) скорость сдвига 5 м/с.

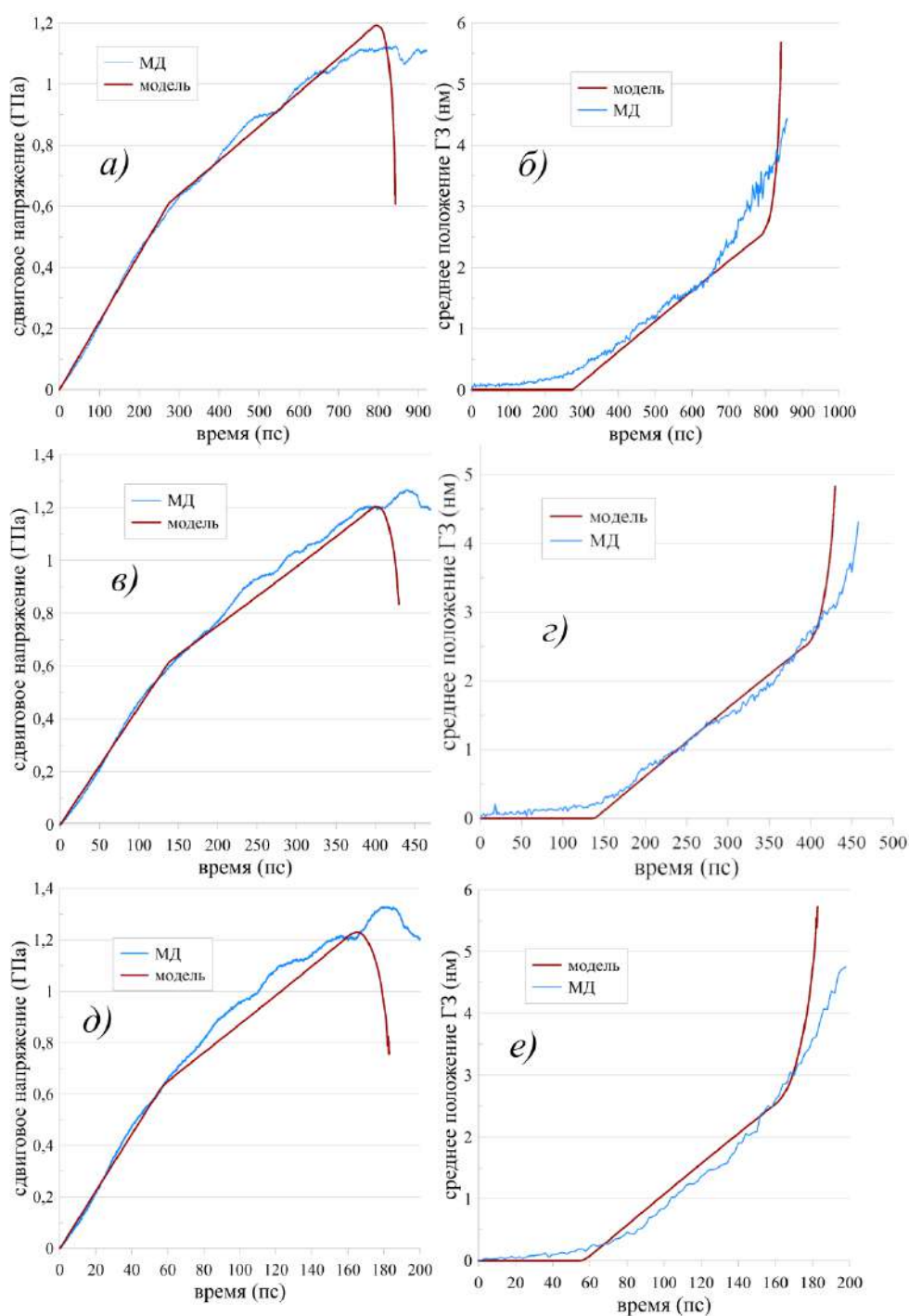


Рис. 3.14. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в бикристалле алюминия с 2% твердым раствором атомов меди и углом разориентировки 4.5° при перпендикулярном сдвиге: (а, б) - скорость сдвига 1 м/с; (в, г) - скорость сдвига 2 м/с; (д, е) - скорость сдвига 5 м/с.

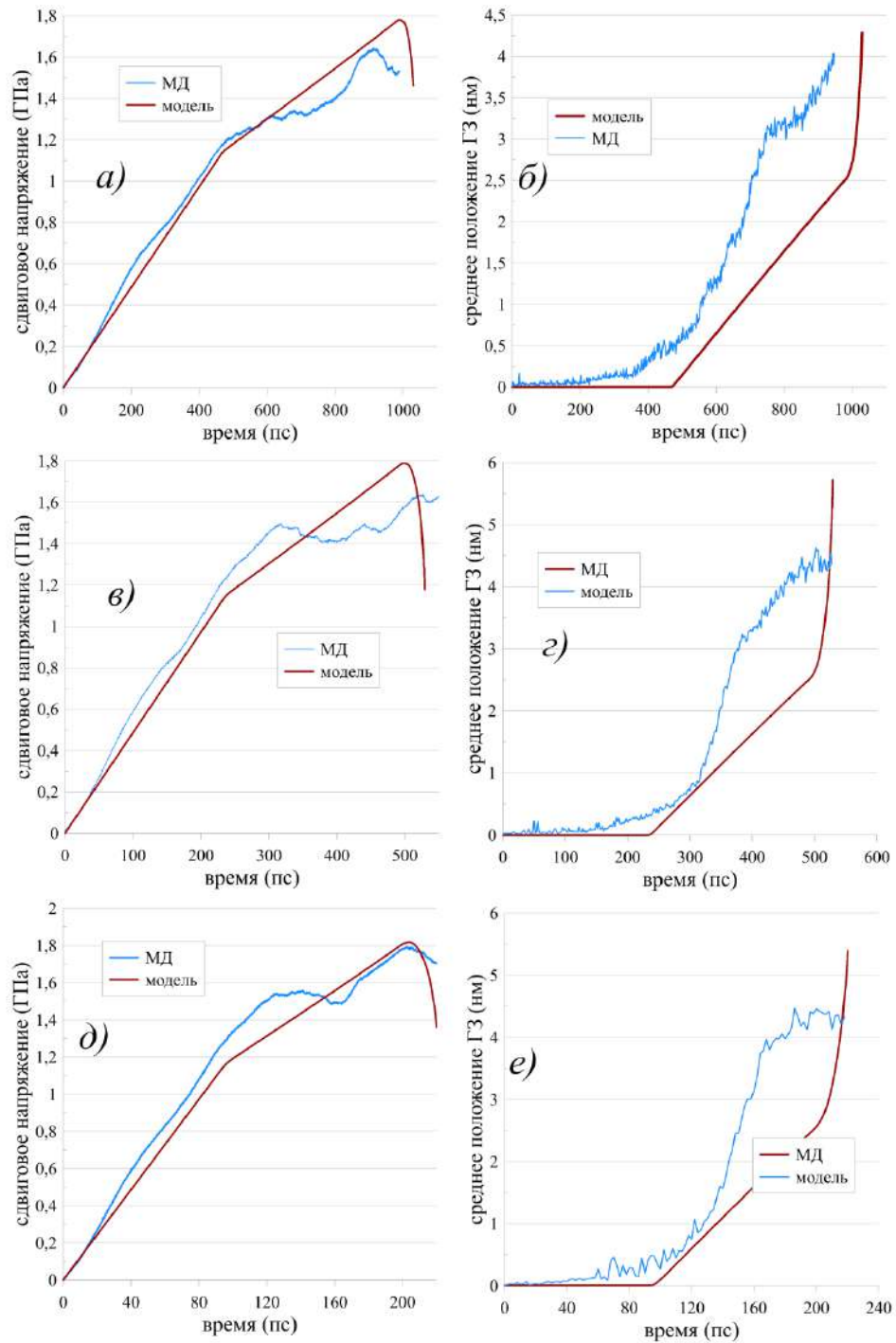


Рис. 3.15. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в бикристалле алюминия с 5% твердым раствором атомов меди и углом разориентировки 4.5° при перпендикулярном сдвиге: (а, б) - скорость сдвига 1 м/с; (в, г) - скорость сдвига 2 м/с; (д, е) - скорость сдвига 5 м/с.

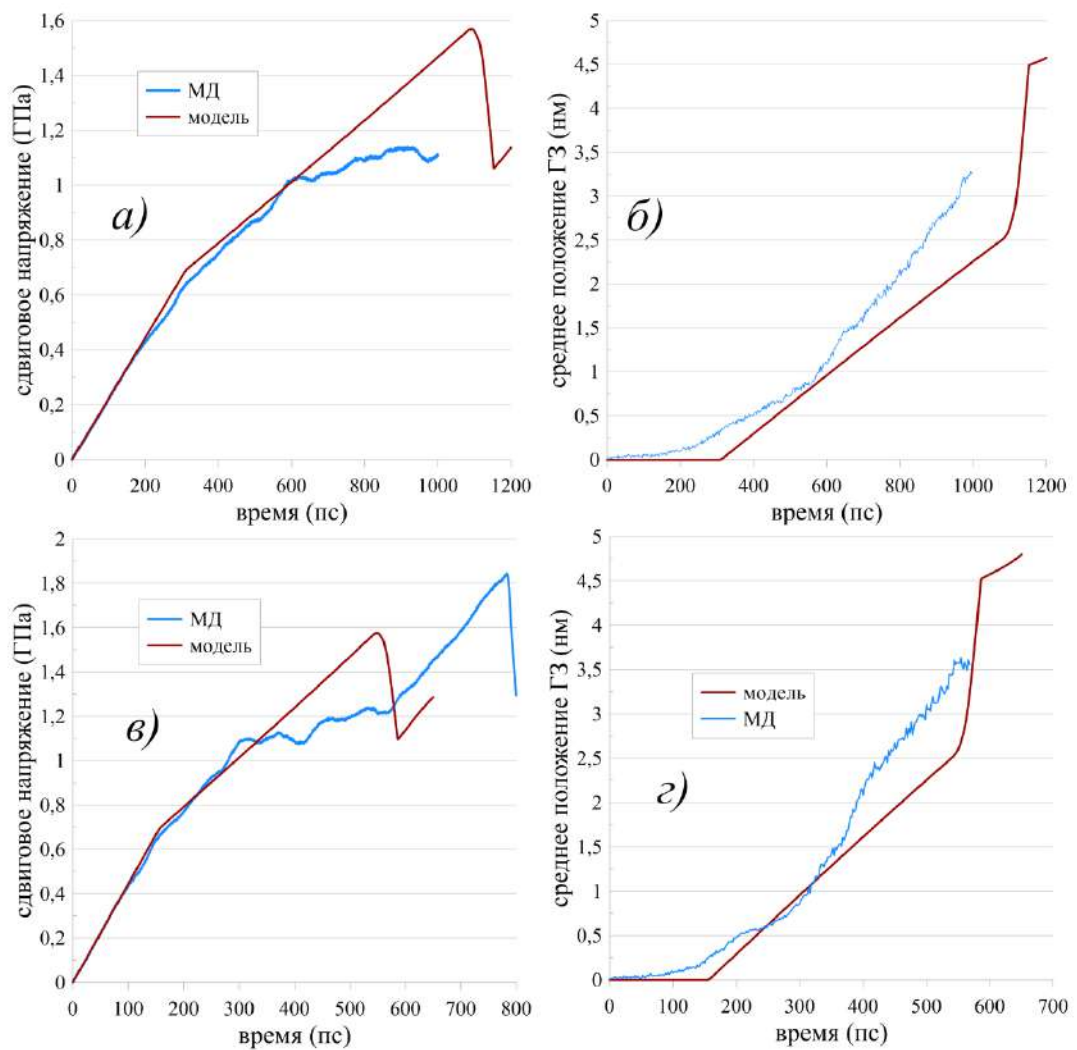


Рис. 3.16. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в бикристалле алюминия с 2% твердым раствором атомов меди и углом разориентировки 8.1° при перпендикулярном сдвиге: (а, б) - скорость сдвига 1 м/с; (в, г) - скорость сдвига 2 м/с.

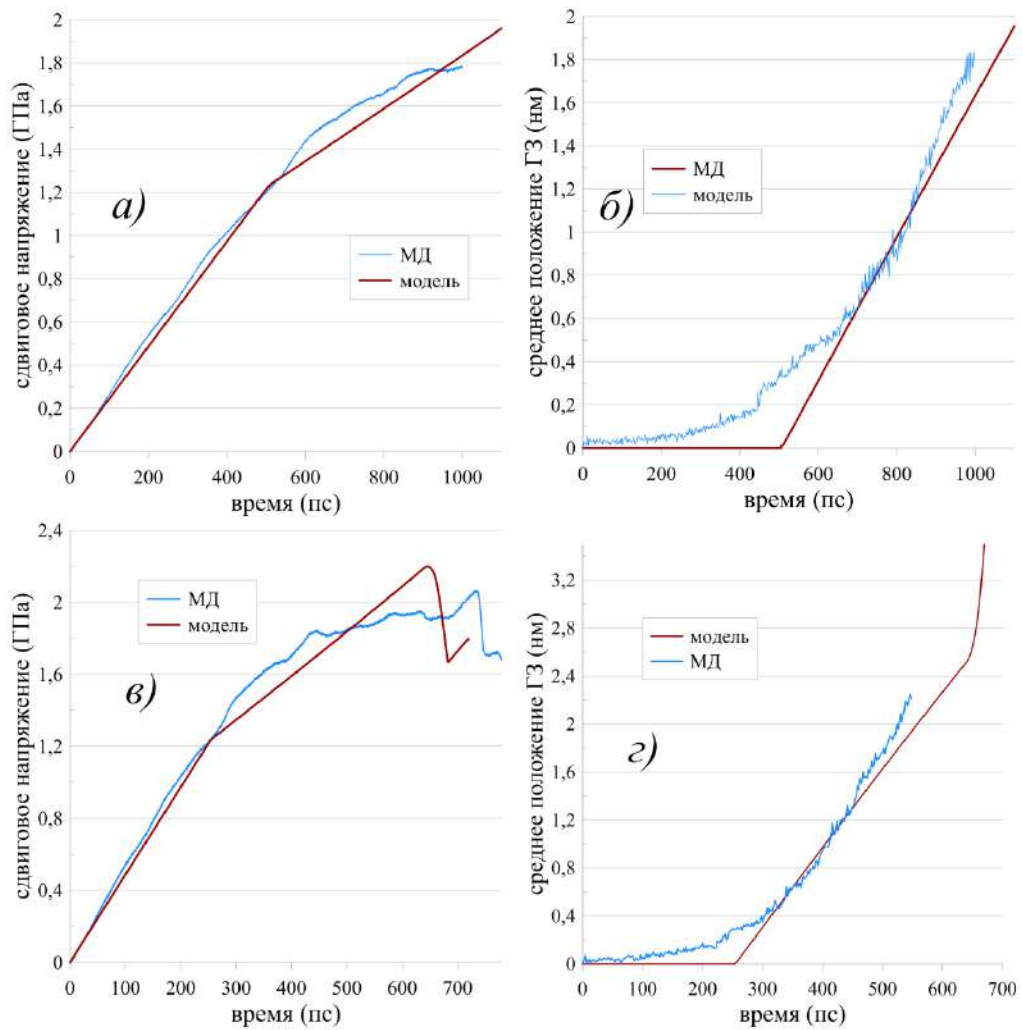


Рис. 3.17. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в бикристалле алюминия с 5% твердым раствором атомов меди и углом разориентировки 8.1° при перпендикулярном сдвиге: (а, б) - скорость сдвига 1 м/с; (в, г) - скорость сдвига 2 м/с.

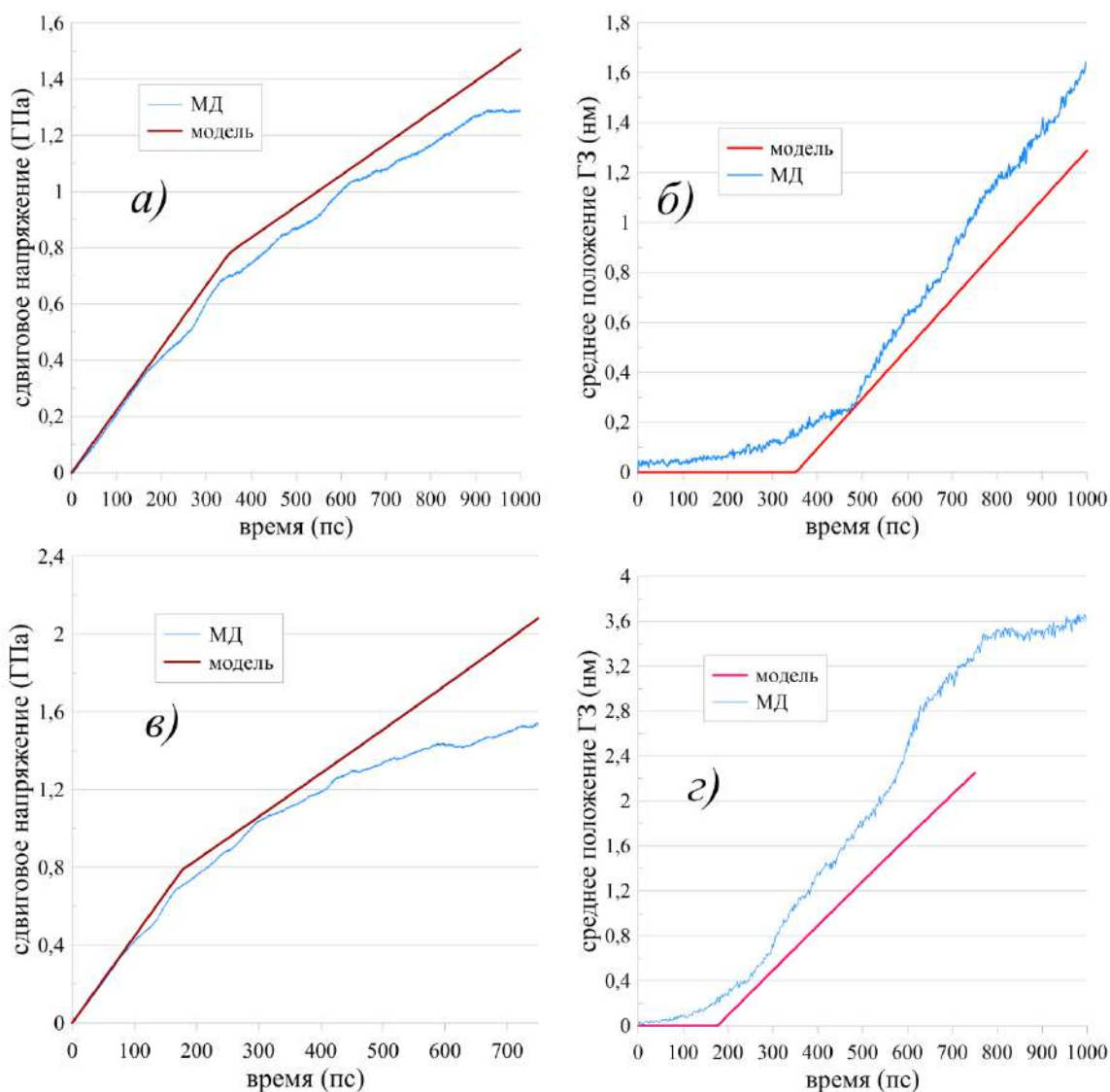


Рис. 3.18. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в бикристалле алюминия с 2% твердым раствором атомов меди и углом разориентировки 12° при перпендикулярном сдвиге: (а, б) - скорость сдвига 1 м/с; (в, г) - скорость сдвига 2 м/с.

Выводы по третьей главе

В первой части настоящей главы исследовалось взаимодействие уединенной краевой дислокации с растворенными атомами меди в алюминиевой матрице (рассматривались концентрации 0.25, 0.5 и 1 ат.%).

Движение дислокации в этом случае затруднено постоянными взаимодействиями с атомами меди, что ведет к повышению уровня сдвиговых напряжений в системе по сравнению с движением дислокации в чистом алюминии. Уровень средних сдвиговых напряжений для алюминия с твердым раствором атомов меди составляет ≈ 250 МПа, а для чистого алюминия ≈ 30 МПа. Также показано, что зоны с высокой концентрацией атомов меди являются сильным барьером для подвижной краевой дислокации, и дислокация может преодолеть ЗВК путем выброса своего сегмента в соседнюю плоскость скольжения. Этот процесс сопровождается образованием вакансий в плоскости скольжения дислокации. Максимумы на зависимости напряжения сдвига (≈ 350 МПа) соответствуют полному переходу дислокации в соседнюю плоскость скольжения в процессе взаимодействия с ЗВК. Распределение локальных сдвиговых напряжений в кристалле показывает, что полный переход дислокации в соседнюю плоскость скольжения является пороговым эффектом и возникает после накопления достаточно больших значений сдвиговых напряжений в областях кристалла, близких к месту нахождения дислокации (≈ 1.6 ГПа).

Во второй части главы приводятся результаты теоретической модели движения малоугловых ГЗ наклона в твердом растворе атомов меди (с концентрацией 2 и 5 ат.%) в алюминиевом кристалле при нормальной температуре. Модель основана на теоретической модели движения малоугловых ГЗ наклона в чистых ГЦК металлах, которая сформулирована во 2 главе диссертации. Текущая модель параметризовывалась по данным МД моделирования. Для данной теоретической модели варьировались 3 параметра: модуль сдвига G , область локализации напряжений вокруг дислокации в кристалле a/b , предел текучести Y_0 . Изменение значений параметров, связано с взаимодействием движущихся зернограничных дислокаций с растворенными атомами меди. В целом, результаты МД и

теоретической модели показывают хорошее количественное и качественное соответствие. Как в численном МД эксперименте, так в результатах теоретической модели наблюдается искривление формы ГЗ. Однако в некоторых случаях есть отклонение в результатах, например, когда зернограничная дислокация задепляется за твердый раствор и перестает двигаться, что не учитывается в теоретической модели. Кривые среднего сдвигового напряжения и среднего положения ГЗ показывают приемлемое соответствие во всех рассмотренных случаях, что подтверждает адекватность сформулированной модели.

Приведенные выше исследования на основе МД моделирования и разработанная теоретическая модель соответствует положению № 3 выносимому на защиту.

Глава 4. Движение дислокаций в алюминиево-медном сплаве упрочненным медными наноразмерными кластерами

В этой главе осуществляется многомасштабное моделирование алюминиевого сплава, упрочненного медными наноразмерными кластерами. Путем МД моделирования исследуются механизмы взаимодействия краевой дислокации и кластеров размером 1-4 нм, рассматриваются несколько скоростей сдвига, температур МД системы и концентраций меди внутри объема кластера. Далее формулируется теоретическая модель преодоления кластера и включается в схему двумерной дискретной дислокационной динамики (2D ДДД) для перехода на более высокий масштабный уровень.

4.1. Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия дислокации с наноразмерным кластером

В данном разделе исследуются атомистические механизмы взаимодействия движущейся краевой дислокации с кластером меди. Постановка МД моделирования включает создание системы, содержащей кластер из атомов меди и краевую дислокацию (рисунок 4.1), нагрев и релаксацию системы, последующую деформацию путем сдвига. Первоначально создается монокристалл чистого алюминия размером $52 \times 60 \times 15$ нм³, оси координат которого ориентированы вдоль кристаллографических направлений $[\bar{1}10]$, $[111]$, $[11\bar{2}]$. Краевая дислокация вводится путем добавления дополнительной атомной полуплоскости в центр кристалла. Далее выбирается сфера диаметром 1-4 нм, пересекающая плоскость скольжения дислокации, и часть случайно выбранных атомов алюминия в этой сфере заменяется атомами меди [116]. Рассматриваются четыре концентрации атомов меди в выбранной сфере, которые равны 20, 50, 80 и 100%, соответственно. Система исследуется при различных температурах: 100, 300, 500 и 700 К.

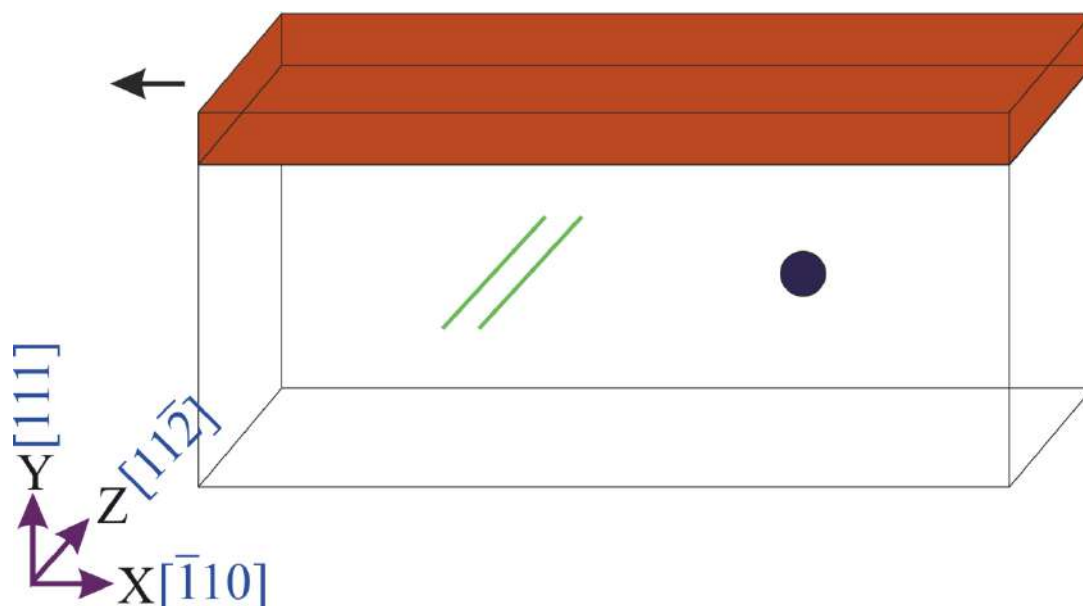


Рис. 4.1. Схема моделирования сдвиговой деформации кристалла алюминия с кластером меди и краевой дислокацией: синий кружок - кластер меди; две зеленые линии - частичные дислокации Шокли (ведущая и замыкающая); красный параллелепипед - часть кристалла, которая движется с постоянной скоростью в направлении, указанном стрелкой.

Подготовка системы и моделирование деформации осуществляется с помощью пакета молекулярной динамики LAMMPS [115]. Межатомные взаимодействия описываются потенциалом типа ADP для системы алюминий-медь [150]. Первый этап моделирования заключается в минимизации энергии и последующем нагреве системы до заданной температуры с помощью термостата Нозе-Гувера при релаксации напряжений с помощью баростата Нозе-Гувера, что соответствует ансамблю системы NPT. При минимизации энергии полная дислокация разделяется на две частичные дислокации Шокли. На этапе деформации выбирается часть системы – тонкий атомный слой толщиной 2 нм, параллельный плоскости X-Z, который затем смещается с постоянной скоростью в направлении оси X для создания сдвиговых напряжений в системе. Рассмотрены две скорости сдвига: 3 и 10 м/с, соответствующие скоростям деформации 2.5×10^7 и 8.3×10^7

с^{-1} . МД моделирование двух скоростей деформации позволяет определить скоростные эффекты и построить модель движения дислокации с их учетом. Кроме того, данные скорости деформации характерны для ударно-волновых воздействий. Значение скоростей деформации до 10^9 с^{-1} достигаются с помощью ультракоротких лазерных импульсов [153-154]. Температура в системе поддерживается с помощью термостата Нозе-Гувера. Деформация на этом этапе соответствует ансамблю NVT.

В случае низких температур кристалла, 100 и 300 К, и скорости сдвига 3 м/с чаще всего реализуется следующие механизмы взаимодействия дислокации и кластера: перерезание включения или обход за счет образование петли Орована вокруг кластера. Для кластеров диаметром 1 нм, петля Орована не образуется, и основным механизмом взаимодействия является перерезание кластера, хотя иногда может проявляться переползание дислокации. Основная часть взаимодействий дислокации с нанометровым кластером происходит по следующему сценарию: (1) дислокация встречает препятствие [рисунок 4.2(а)] и замедляется [рисунок 4.2(б)]; (2) сегмент дислокации, контактирующий с включением, останавливается, а остальная часть дислокации продолжает двигаться, изгибаться и увеличивать свою длину под действием напряжения сдвига [рисунок 4.2(б)]; (3) увеличение длины дислокации вызывает концентрацию локальных напряжений сдвига на включении; (4) после достижения критического локального напряжения дислокация разрезает кластер и отделяется от него [рисунок 4.2(в)], атомы включения покидают узлы решетки алюминия и приобретают повышенное значение параметра центральной симметрии [117]; (5) дислокация восстанавливает свою первоначальную длину и продолжает движение до следующего взаимодействия [рисунок 4.2(г)]. При таких взаимодействиях дислокация не меняет исходную плоскость скольжения [рисунок 4.2(д, е)]. После взаимодействия медный кластер меняет свою форму и слегка

растягивается в направлении сдвига, что видно из комбинированных изображений на рисунке 4.2(а, б, в, г), на которых приведены только дислокационные линии и атомы меди. Пройдя периодическую границу, дислокация снова взаимодействует с включением и разрезает препятствие. Это происходит в течение всего времени моделирования деформации, а каждый процесс взаимодействия занимает около 90 пс для данной скорости сдвига. Были рассмотрены различные концентрации меди внутри включения (от 20 до 100 %) и сделан вывод, что нет существенной разницы в механизмах взаимодействия на атомном уровне для данных концентраций.

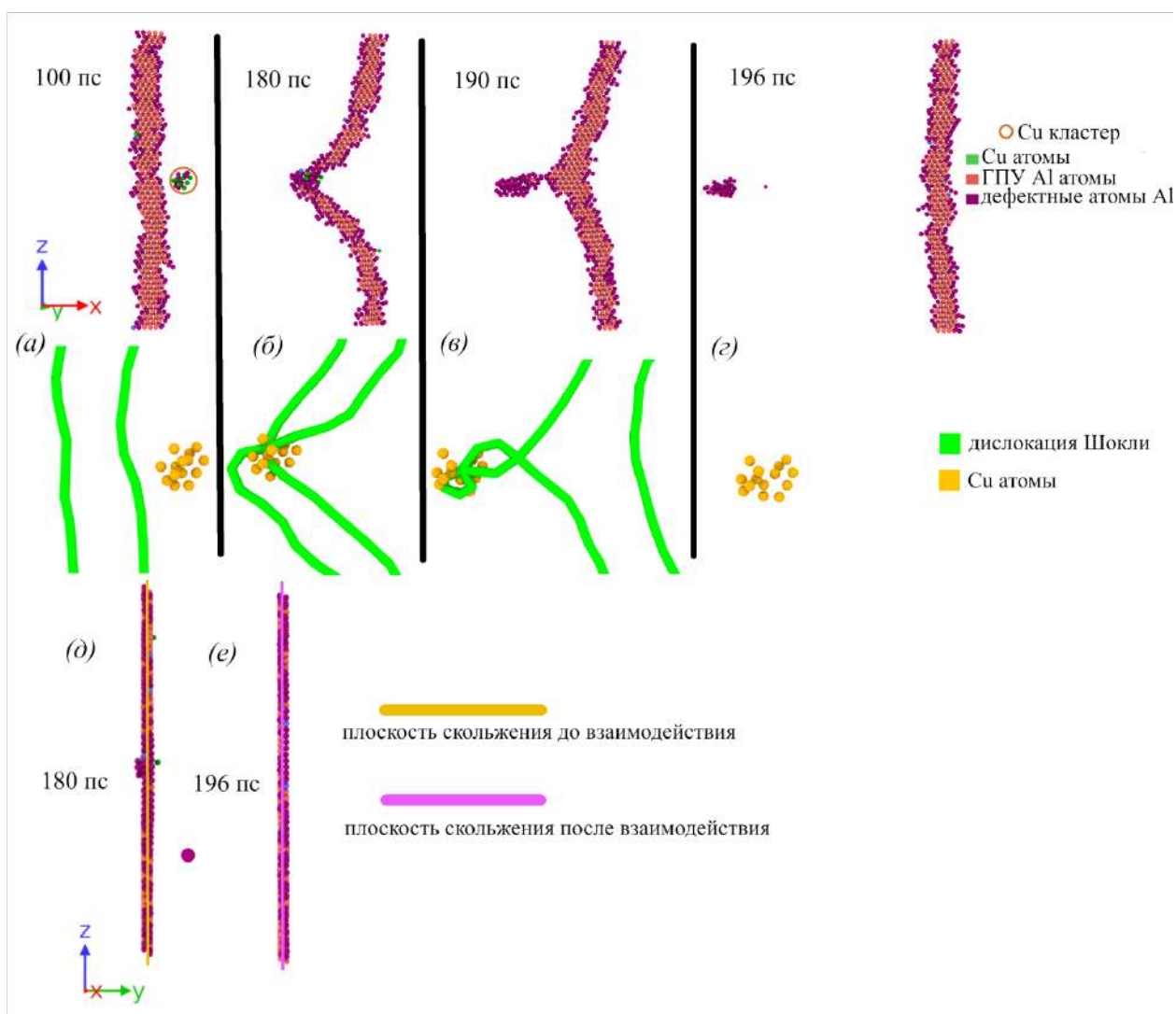


Рис. 4.2. Взаимодействие дислокации с кластером меди (20 ат.%) в алюминии при скорости сдвига 3 м/с и температуре 300 К: (а) дислокация движется

навстречу включению, (б) торможение и изгиб дислокации во время взаимодействия с включением, (в) разрез включения дислокацией без перехода в соседнюю плоскость скольжения, (г) отделение дислокации от включения, (д) плоскость скольжения дислокации до взаимодействия и (е) плоскость скольжения дислокации после взаимодействия - совпадение плоскостей означает, что дислокация не выбрасывает свой сегмент в соседнюю плоскость скольжения во время взаимодействия.

При нагреве МД системы до 500 или 700 К частота событий перепозания дислокации увеличивается, но перерезание остается основным механизмом преодоления кластера диаметром 1 нм (рисунок 4.3). При событии переползания дислокация выбрасывает свой сегмент в соседнюю плоскость скольжения, чтобы обойти кластер. В отличие от перерезания кластера (рисунок 4.2) в случае переползания наблюдается формирование дислокационной ступеньки при взаимодействии растянутой дислокации с включением, когда частичные дислокации (ведущая и замыкающая) вблизи включения соединяются в полную дислокацию - рисунок 4.3(б, в). Пройдя препятствие, дислокация оставляет за собой след вакансий, что связано с переходом отошедшего сегмента обратно в исходную плоскость скольжения - рисунок 4.3(г). Увеличение частоты переползания для преодоления включения можно объяснить следующим образом: при высоких температурах тепловые колебания атомов кристаллической решетки способствуют выходу дислокационного сегмента из начальной плоскости скольжения при его взаимодействии с включением.

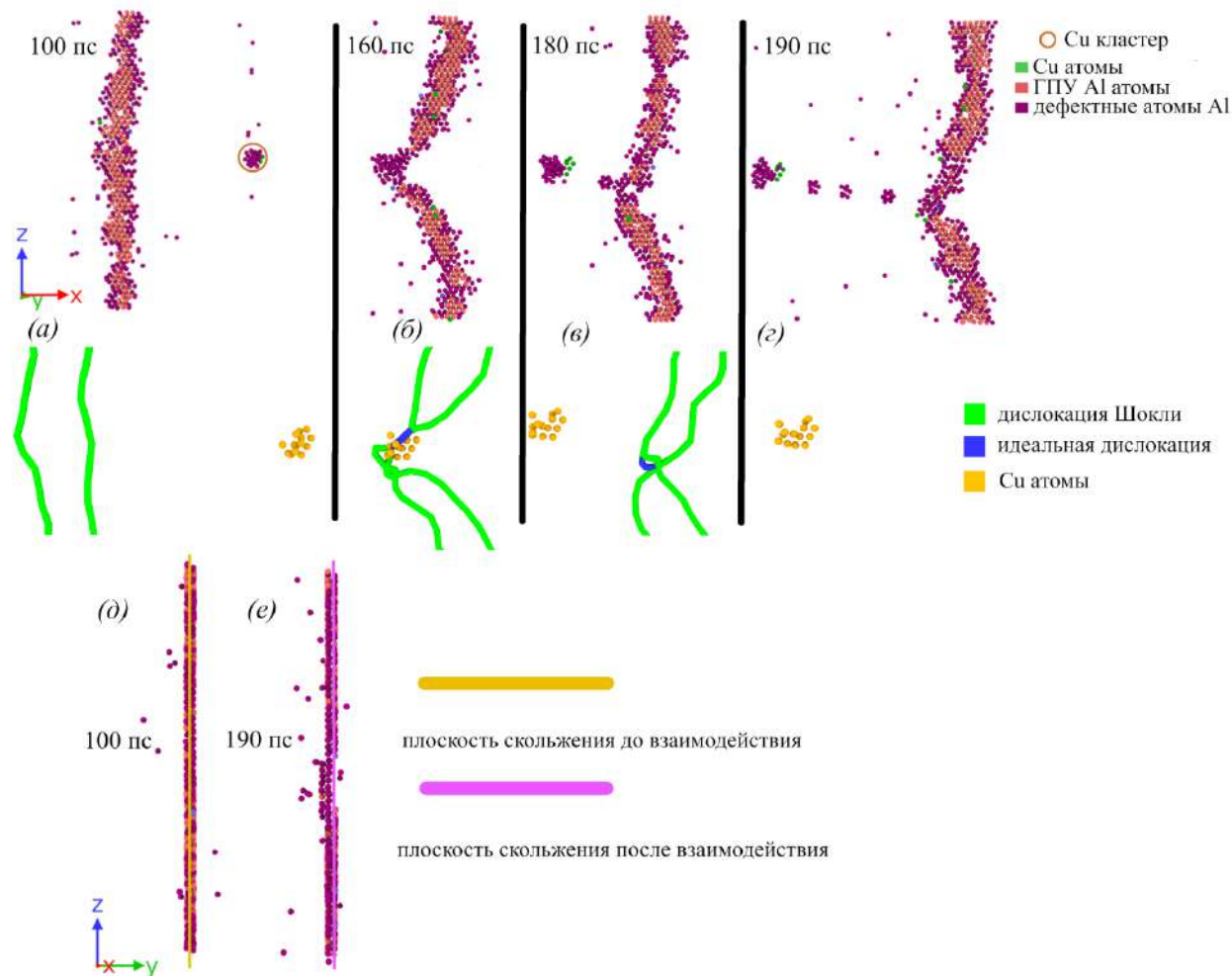


Рис. 4.3. Взаимодействие краевой дислокации в кристалле алюминия с кластером меди (20 ат.%) при скорости сдвига 3 м/с и температуре кристалла 500 К: (а) дислокация находится перед включением, (б) торможение дислокации при взаимодействии с включением и изгиб дислокационной линии вокруг включения, (в) переход дислокационного сегмента в соседнюю плоскость скольжения, (г) образование вакансий при возвращении дислокационного сегмента в основную плоскость скольжения, (д) плоскость скольжения дислокации до взаимодействия и (е) плоскость скольжения дислокации после взаимодействия. Изолированные ГЦК атомы на рисунках 4.2 – 4.3 имеют повышенное значение параметра centrosymmetry из-за интенсивных тепловых флуктуаций при повышенной температуре.

4.1.1. Напряженное состояние молекулярно-динамической системы

Для расчета распределений локальных напряжений в кристалле рассчитывается тензор напряжений на атом, и значение напряжений усредняются по сфере диаметром 1 нм (аналогично тому, как описано в разделе 2.3). Пространственное распределение локальных сдвиговых напряжений в начале взаимодействия дислокации с кластером, рисунок 4.4(а), демонстрирует две области: перед дислокацией и за ней - с существенно повышенным и пониженным уровнем локальных напряжений. Изгиб сегментов дислокации сопровождается увеличением их натяжения, что приводит к концентрации напряжений на включении. После достижения критического уровня локальных напряжений, рисунок 4.4(б), начинается перерезание медного включения.

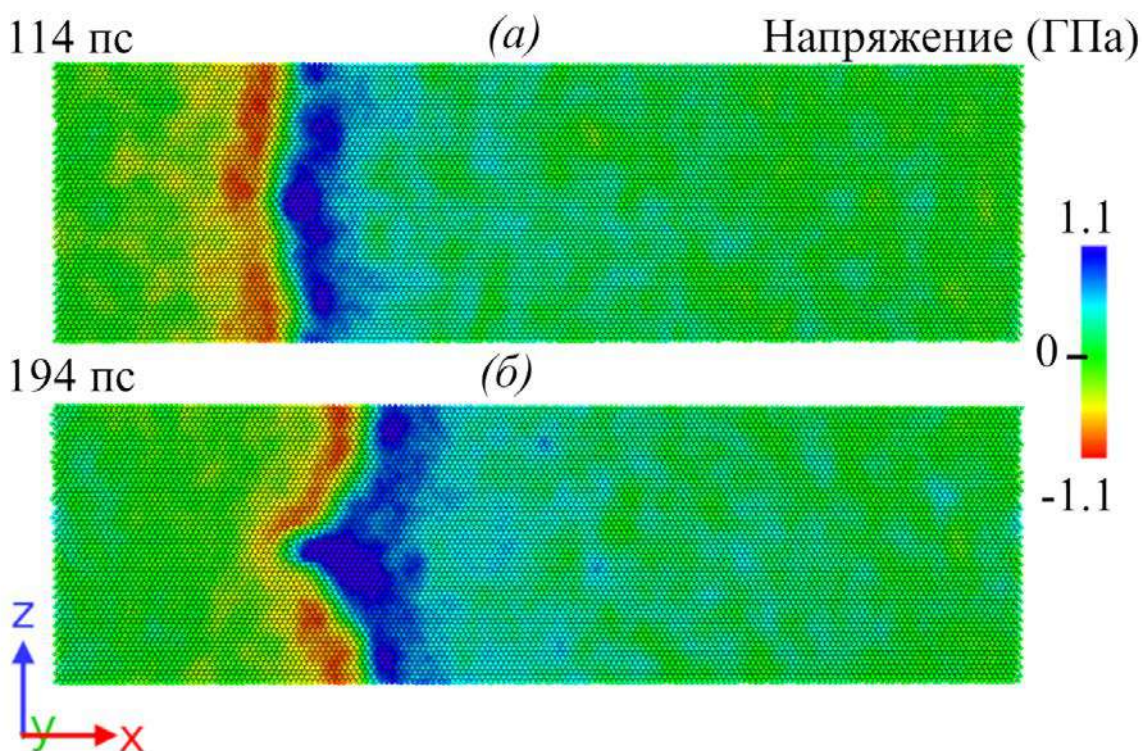


Рис. 4.4. Распределение локальных напряжений сдвига σ_{xy} при взаимодействии дислокации с кластером меди (20 ат.%) в алюминии при скорости сдвига 3 м/с: (а) дислокация останавливается, когда начинает взаимодействовать с кластером, (б) перерезания кластера дислокацией.

Эволюция среднего напряжения сдвига приведена на рисунке 4.5 для различных концентраций кластеров меди и различных температур МД системы при постоянной скорости сдвига 3 м/с. Первые максимумы на всех кривых находятся в диапазоне 40-70 МПа, что соответствует флуктуации скорости движения дислокации в чистом кристалле до взаимодействий – это достаточно хорошо описано в работе [98]. Каждый последующий максимум относится к конкретному взаимодействию и отрыву дислокации от кластера меди. Напряжение увеличивается, когда дислокация взаимодействует с препятствием, поскольку дислокация замедляется, и напряжение снова падает, когда дислокация отделяется от кластера.

Анализ полученных кривых напряжений указывает на отсутствие явной зависимости напряжения перерезания включений от концентрации меди в объеме кластера. Кроме того, максимальное напряжение для фиксированной концентрации может значительно варьироваться от взаимодействия к взаимодействию случайным образом. Оцененное среднее значение максимального напряжения для 300 К и концентрации меди 50 ат.% составляет 142 МПа при стандартном отклонении 13 МПа. Чтобы понять такое поведение, проведены дополнительные статистические исследования напряжений: в МД системе с фиксированной концентрацией, атомы меди по-разному располагаются внутри объема включения - рисунок 4.6. Поведение данных кривых напряжения аналогично в качественном смысле: длительность взаимодействий совпадает, и нет четкой зависимости амплитуды напряжения от начального распределения атомов меди для каждого кластера. Статистическая оценка получается путем вычисления математического ожидания и среднеквадратичного отклонения. Среднее значение максимального напряжения по всем взаимодействиям составляет 143 МПа со стандартным отклонением 14 МПа. Среднее значение и разброс данных для одной концентрации меди очень близки к результатам,

полученным для различных концентраций атомов внутри кластера. Можно сделать вывод, что каждый кластер меди создает в среднем одинаковый упрочняющий эффект для концентраций атомов меди во включении более 20 % при фиксированной температуре. Поскольку упрочнение создается атомами меди на плоскости скольжения (что обсуждается в разделе 4.1.2), то с учетом случайного распределения атомов меди внутри кластера в среднем возникает одинаковый эффект упрочнения.

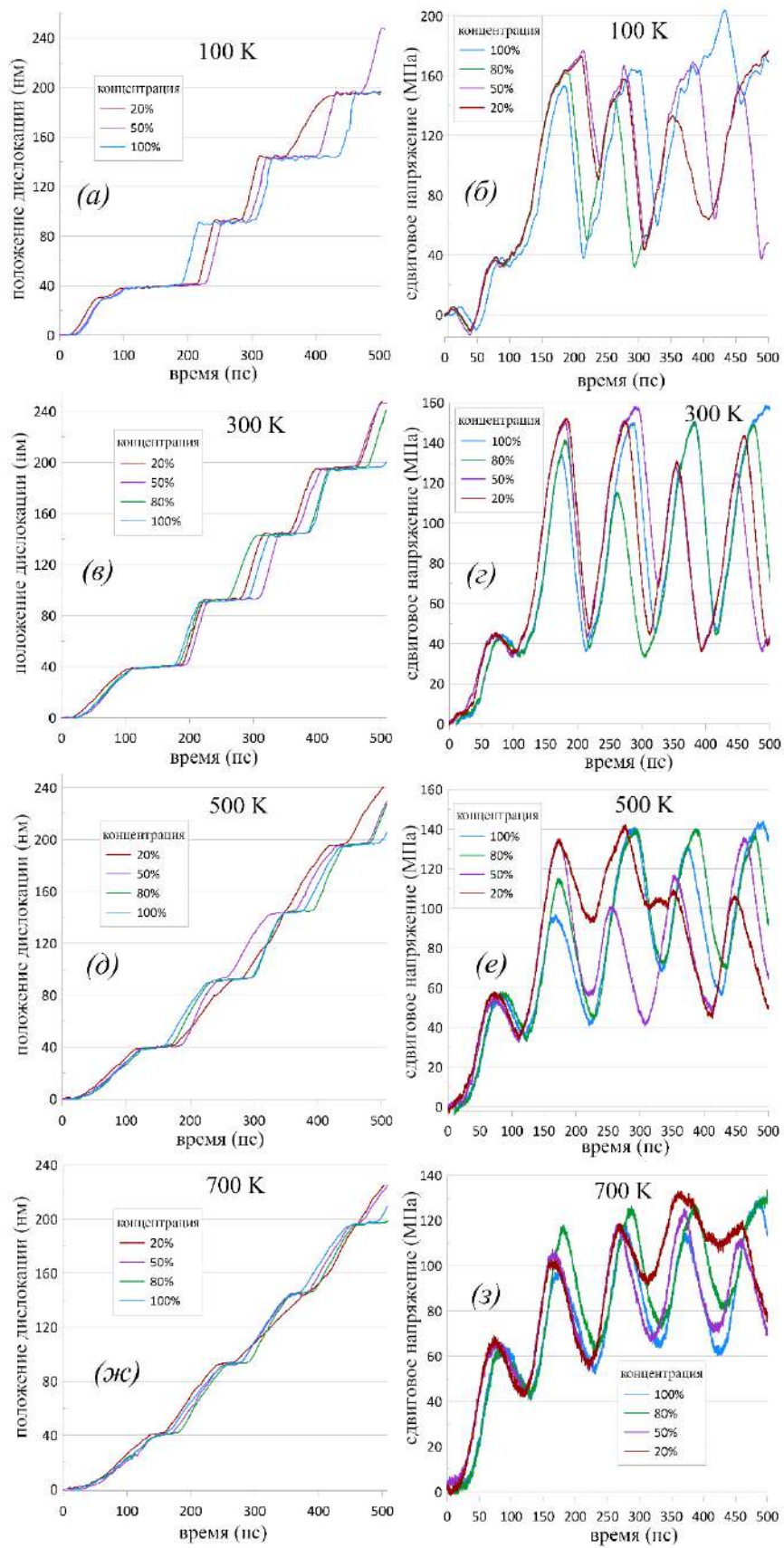


Рис. 4.5. Временные зависимости положения дислокации (а, в, д, ж) и среднего напряжения сдвига (б, г, е, з) в течение взаимодействий дислокации с кластером атомов меди для разных температур и концентраций атомов меди: 100К - (а), (б); 300К - (в), (г); 500К - (д), (е); 700К - (ж), (з). Скорость сдвига 3 м/с.

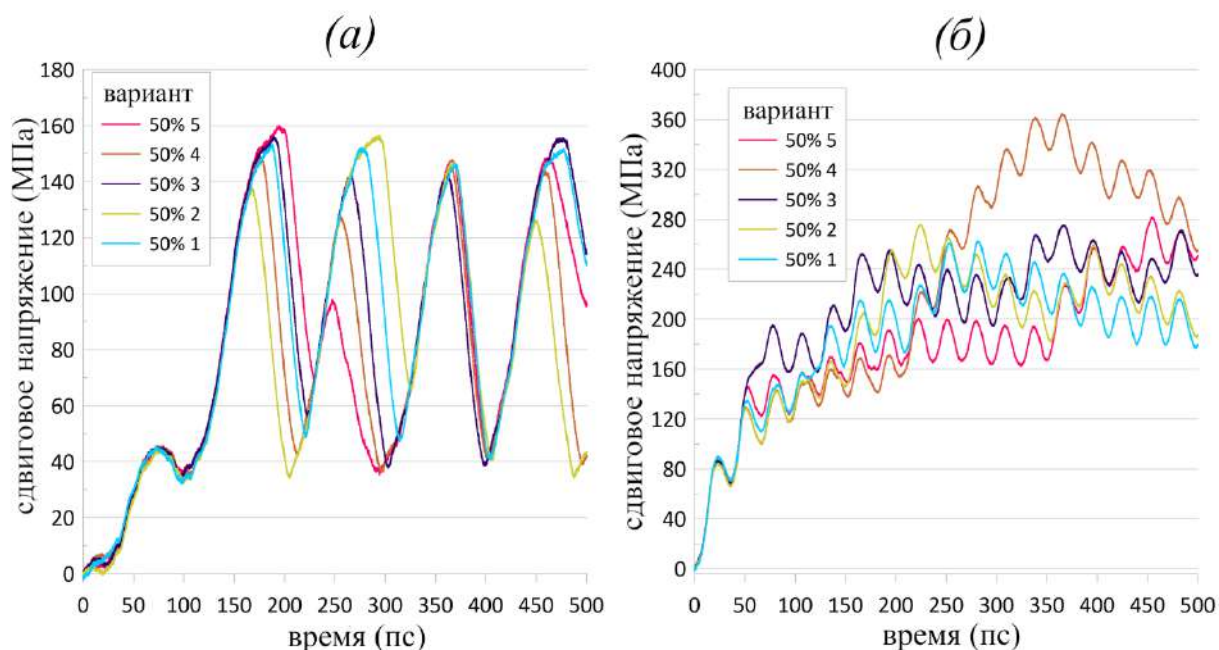


Рис. 4.6. Сравнение кривых напряжения сдвига для различных кластеров меди (разное случайное распределение атомов в пространстве) с концентрацией 50 ат.% для скорости сдвига 3 м/с (а) и 10 м/с (б).

С ростом температуры МД системы уменьшается уровень сдвигового напряжения - рисунок 4.5. Средние максимальные напряжения равны 161 МПа для 100 К, 142 МПа для 300 К, 125 МПа для 500 К и 116 МПа для 700 К. Помимо этого, уменьшается амплитуда колебаний, связанных с взаимодействием дислокации с наноразмерным кластером - рисунок 4.5(б, г, е, з). Оба эти факта указывают на то, что дислокация легче преодолевает препятствие с повышением температуры. Повышение температуры также увеличивает количество событий переползания. Анализ величины

максимумов напряжений при различных взаимодействиях, вместе с рассматриваемым механизмом преодоления при каждом взаимодействии для фиксированной температуры, не позволяет установить однозначное соответствие между величиной максимума и реализованным механизмом (процессом перерезания или переползания). Когда дислокация свободно перемещается между взаимодействиями с включением, то она может набирать большую скорость из-за высокого уровня сдвиговых напряжений – в этом случае скорость дислокации определяется фононным трением. Повышение температуры приводит к увеличению фононного трения, что вызывает уменьшение скорости дислокации при свободном движении между взаимодействиями, поэтому количество взаимодействий остается неизменным для всех температур, представленных на рисунке 4.5.

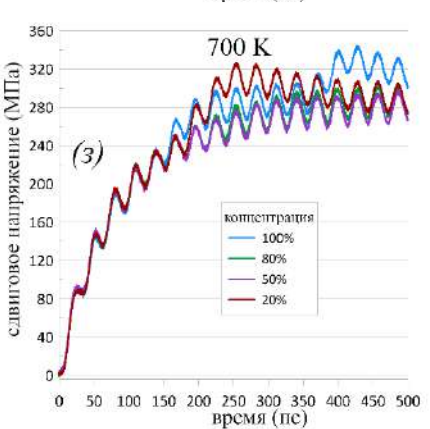
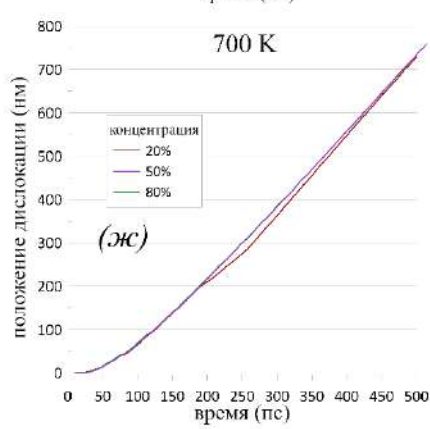
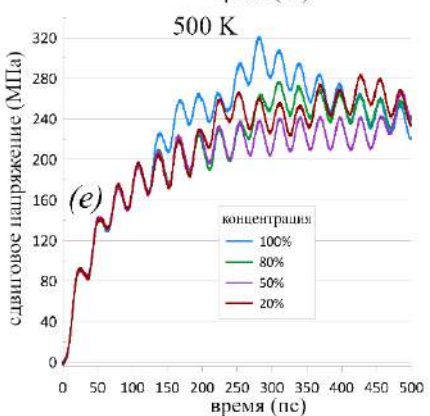
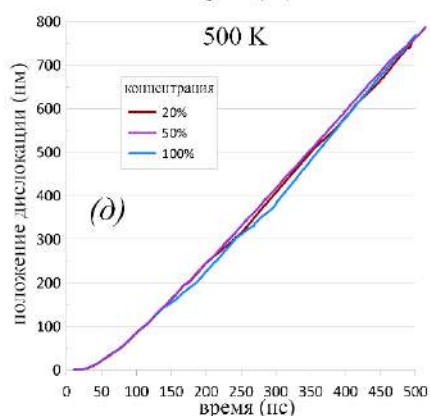
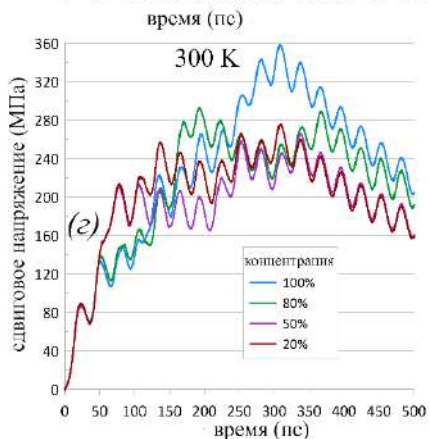
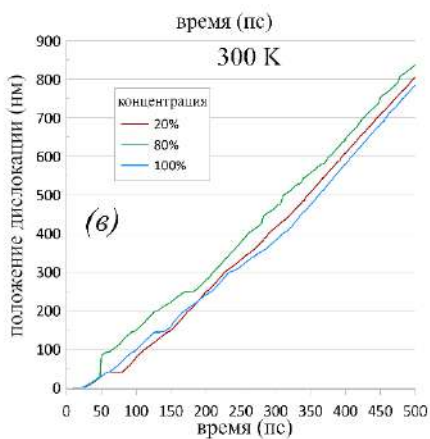
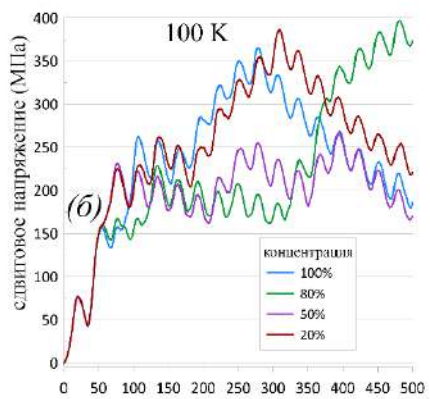
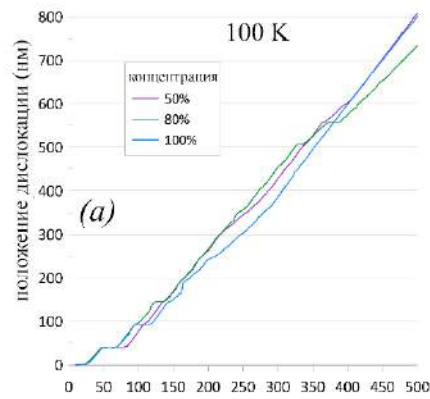


Рис. 4.7. Временные зависимости положения дислокации (а, в, д, ж) и среднего напряжения сдвига (б, г, е, з) в течение взаимодействий дислокации с кластером атомов меди для разных температур и концентраций атомов меди: 100К - (а), (б); 300К - (в), (г); 500К - (д), (е); 700К - (ж), (з). Скорость сдвига 10 м/с.

При скорости сдвига 10 м/с, рисунок 4.7, дислокация движется быстрее и успевает совершить большее количество взаимодействий с медным кластером, и из-за этого проявляются новые особенности движения дислокации, и ее взаимодействия с включением. Если при взаимодействии дислокации с кластером происходит переползание, то дислокация движется со своим сегментом, который находится в соседней плоскости скольжения. Этот сегмент соединяется с остальной частью дислокации при помощи винтовых сегментов – образованная ступенька увеличивает полную энергию линии дислокации, затрудняет ее движение и снижает среднюю скорость дислокации. В результате уменьшения скорости дислокации, скорость пластической релаксации в МД системе снижается, что приводит к увеличению действующих средних напряжений. На кривых напряжения это выражается в четко различимом увеличении напряжений после нескольких взаимодействий, происходящих примерно при одном и том же уровне напряжения. Конфигурация со ступенькой на линии дислокации является метастабильным состоянием, и дислокация стремится переместить все свои сегменты в одну плоскость, испуская вакансии. В этом случае увеличивается длина отрезка, лежащего в прилегающей плоскости. Через некоторое время дислокация полностью переходит в соседнюю плоскость скольжения, после чего взаимодействие с включением происходит только за счет упругого поля. Из-за уменьшения эффективного размера препятствия в новой плоскости

снижается прочность препятствия для дислокации, что приводит к постепенному снижению напряжений в системе.

4.1.2. Влияние размера кластера, конфигурации и концентрации атомов меди в кластере на характер упрочнения

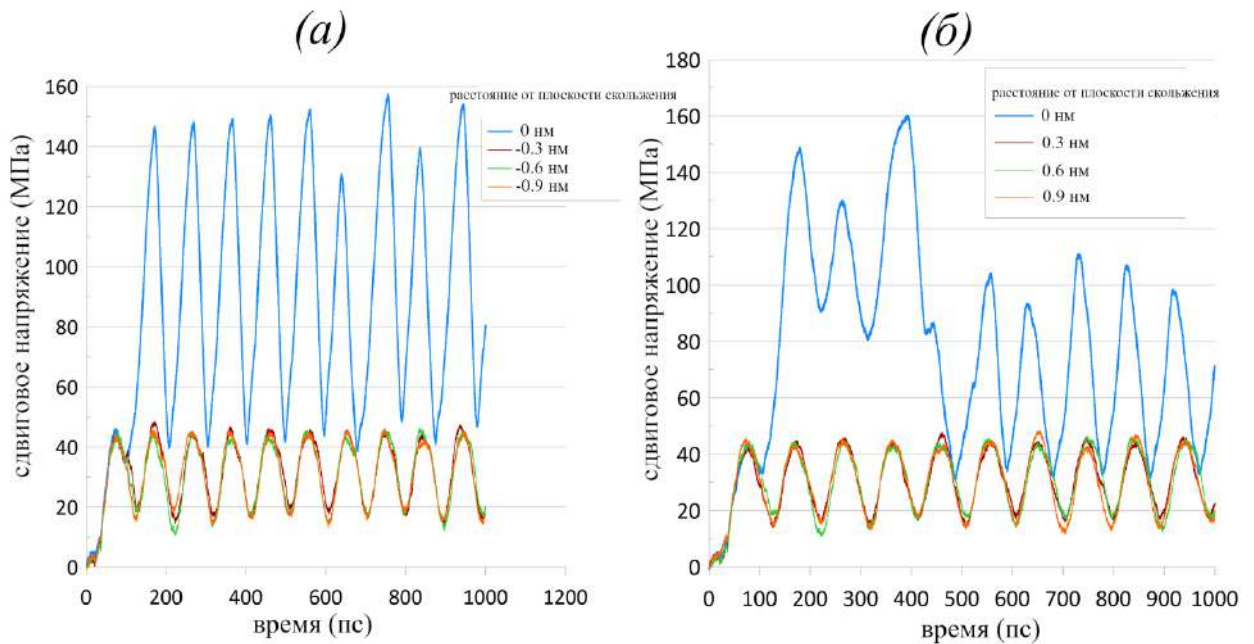


Рис. 4.8. Зависимости напряжения сдвига от времени для случая половин кластера: (а) половина кластера находится на разном расстоянии “внизу” от плоскости скольжения; (б) половина кластера находится на разном расстоянии “вверху” от плоскости скольжения. “Вверх” и “низ” определены условно.

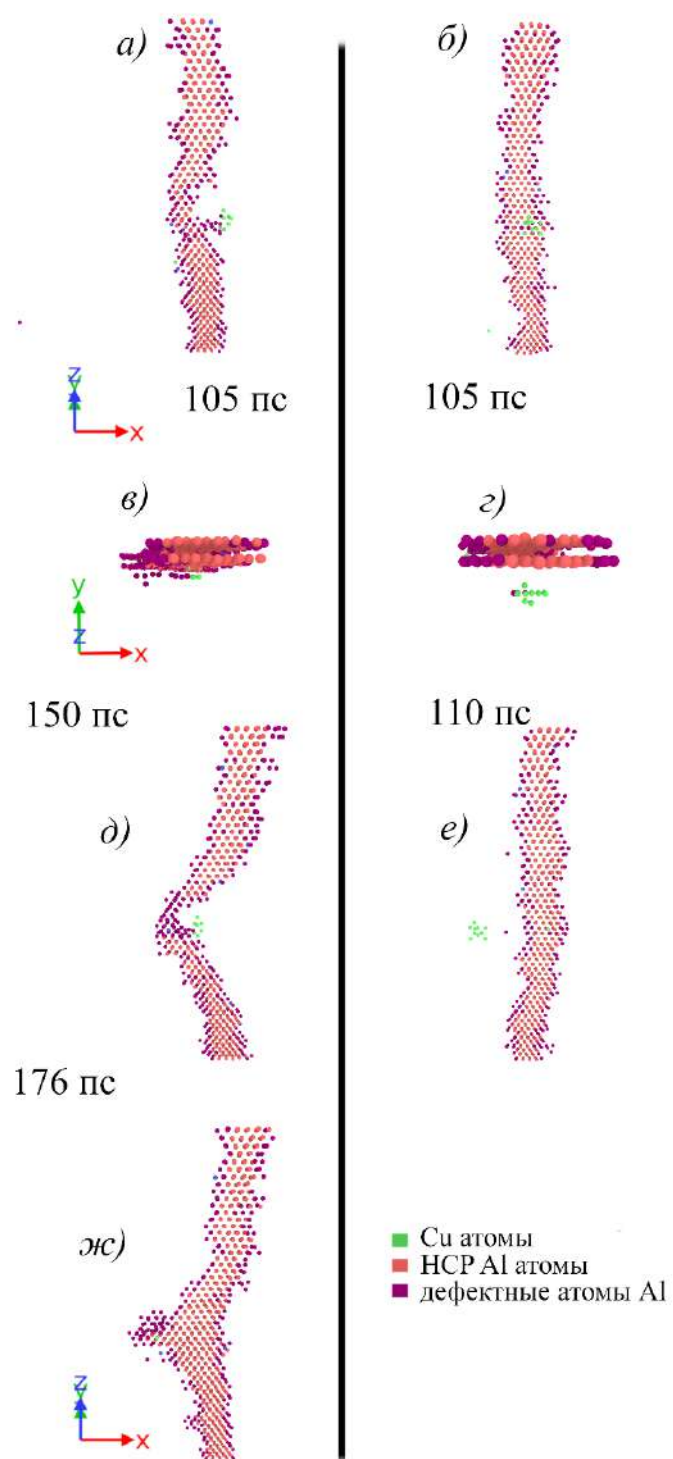


Рис. 4.9. Взаимодействие дислокации с половиной кластера: (а, в, д, ж) - кластер находится на плоскости скольжения, (б, г, е) - кластер находится на расстоянии -0.6 нм от плоскости скольжения.

Несмотря на то, что в процессе последовательных взаимодействий дислокации с медным кластером сам кластер теряет первоначальную форму (рисунки 4.8 – 4.9), в данном разделе показано, что упрочняющий эффект от деформированного кластера сохраняется. Чтобы наглядно продемонстрировать это, было проведено несколько МД моделирований с системой, содержащей краевую дислокацию и половину кластера, которая находится выше и ниже плоскости скольжения на расстоянии 0, 0.3, 0.6 и 0.9 нм от неё. Из анализа кривых сдвигового напряжения на рисунке 4.8 можно сделать вывод, что пока атомы меди находятся на плоскости скольжения, в системе происходит упрочнение - дислокация взаимодействует с атомами меди и соответствующие амплитуды колебаний кривых напряжения равны амплитудам, которые возникают для случая полного кластера [рисунки 4.5(г); 4.6(а)]. Однако, по мере удаления кластера от плоскости скольжения (для всех рассмотренных расстояний от плоскости скольжения: 0.3, 0.6 и 0.9 нм) эффект упрочнения исчезает, и колебания кривой сдвигового напряжения остаются такими же, как для системы без кластера - рисунок 4.16(а). Атомистическое представление данного процесса, рисунок 4.9, подтверждает эти выводы: видно, что дислокация цепляется за кластер, когда атомы меди находятся на плоскости скольжения [рисунок 4.9(а, в, д, ж)] и не испытывает сопротивления движению, когда атомы меди расположены на любом расстоянии от плоскости скольжения [рисунок 4.9(б, г, е)].

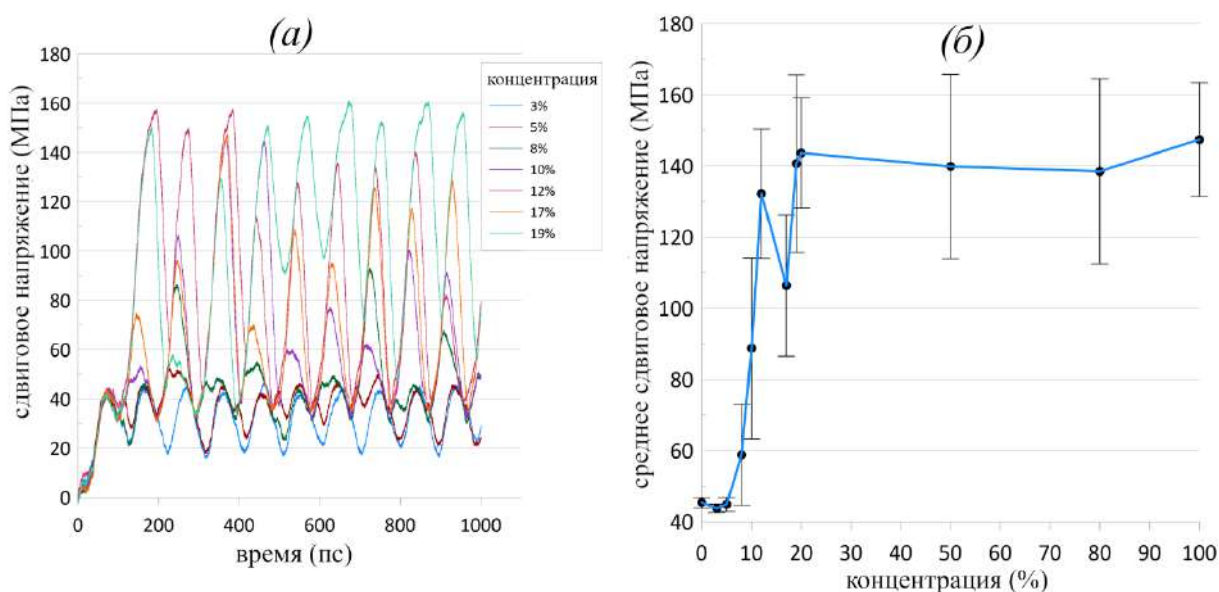


Рис. 4.10. Сдвиговые напряжения в МД системе для кластера размером 1 нм и следующих концентраций атомов меди: 3, 5, 8, 10, 12, 17 и 19 %. (а) кривые напряжения сдвига в процессе деформации; (б) среднее значение по максимальным напряжениям сдвига при каждом взаимодействии дислокации с кластером.

Поскольку для основных рассмотренных концентраций 20, 50, 80 и 100 % атомов меди во включении эффект упрочнения кластера в среднем одинаков, дополнительно проведены исследования для более низких концентраций. Рассчитывалось математическое ожидание по пиковым напряжениям, соответствующим взаимодействиям, а также вычислялось среднеквадратичное отклонение. Анализируя рисунок 4.10(б), где показаны средние пиковые напряжения по всем взаимодействиям, можно сделать вывод, что с увеличением концентрации наступает насыщение для критических напряжений: выше концентрации 12 ат.% упрочнение достигает стационарного состояния со средним значением примерно 140 МПа, что соответствует результатам предыдущего раздела. До 12 ат.% происходит резкое повышение критических напряжений с увеличением концентрации, и

связано с тем, что на плоскости скольжения находится малое количество атомов меди.

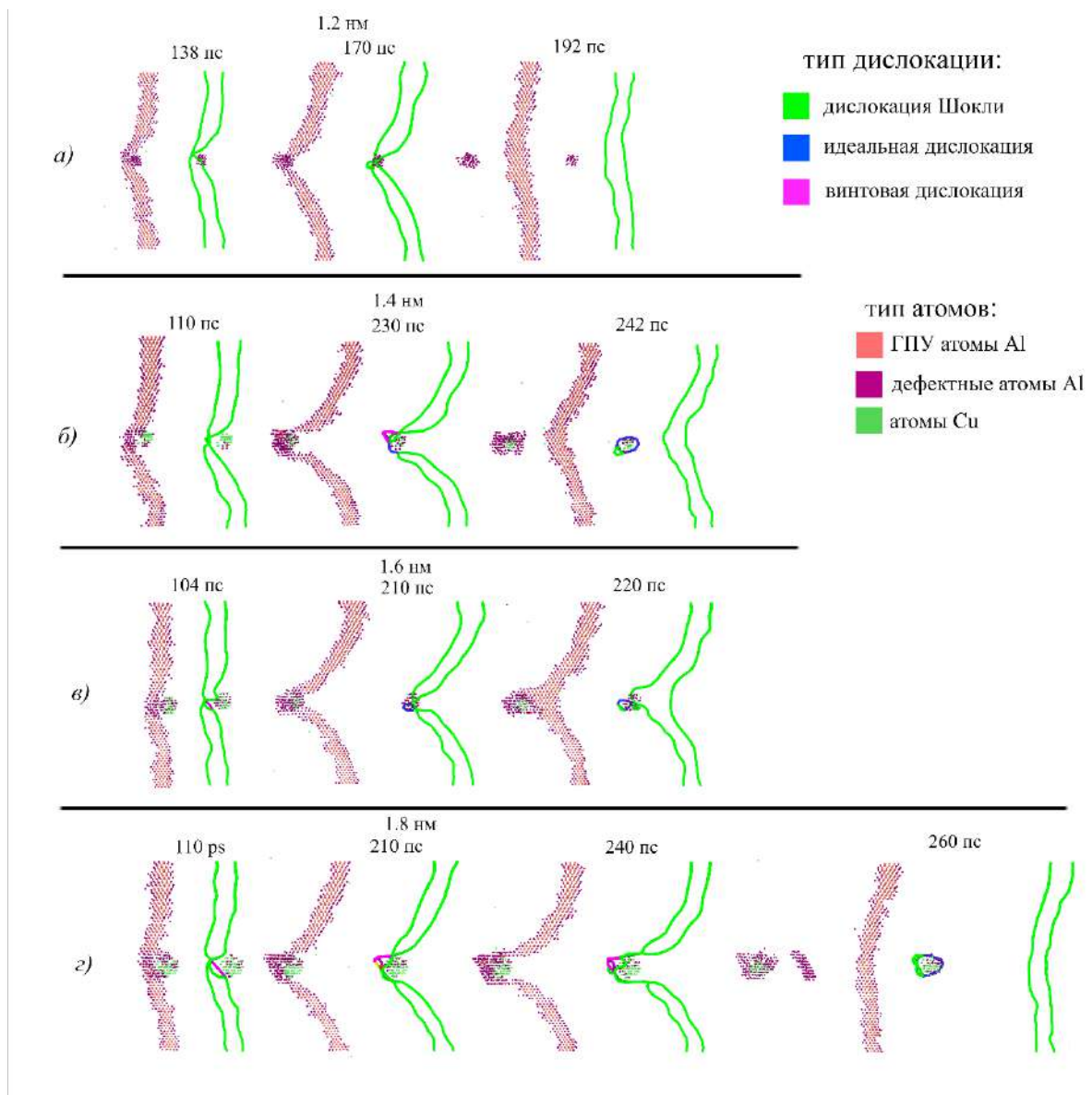


Рис. 4.11. Первое взаимодействие краевой дислокации с кластерами меди различных диаметров: (а) 1.2 нм; (б) 1.4 нм; (в) 1.6 нм; (г) 1.8 нм. Начиная с диаметра 1.4 нм взаимодействие происходит по механизму Орована, в то время как для кластера диаметром 1.2 нм и для ранее рассмотренного случая кластера диаметром 1 нм реализуется механизм перерезания.

Изменение размера включения влияет на механизм взаимодействия дислокации с кластером меди - рисунок 4.11. Если взаимодействие с

кластером, который имеет диаметр 1.2 нм, по-прежнему сопровождается перерезанием, рисунок 4.11(а), то для больших диаметров, начиная с 1.4 нм, рисунок 4.11(б, в, г), дислокация начинает обходить препятствие, образуя петлю Орована, что можно увидеть как на атомном представлении, так на дислокационном. Сдвиговые напряжения, необходимые для преодоления препятствия, растут с увеличением диаметра кластера (рисунок 4.12). С другой стороны, для кластера диаметром 1.4 нм наблюдается повышенное значение средних пиковых напряжений [рисунок 4.12(б)]: кривая напряжения сдвига показывает [рисунок 4.12(а)], что примерно через 700 пс начинается резкое возрастание напряжений – это связано с переходом дислокации в соседнюю плоскость скольжения. Из-за размеров данного кластера и статистического разброса атомов меди внутри него эта плоскость, по-видимому, имеет большой упрочняющий эффект.

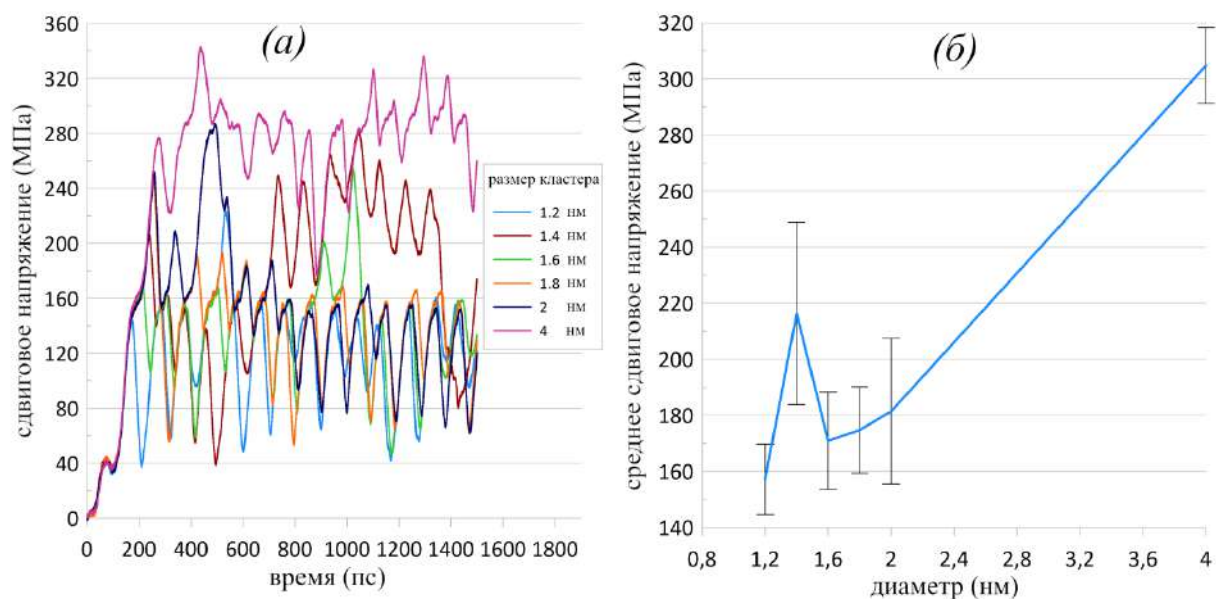


Рис. 4.12. Сдвиговые напряжения в МД системе для следующих размеров медного кластера: 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2 и 4 нм. (а) кривые напряжения сдвига в процессе деформации; (б) среднее значение по максимальным напряжениям сдвига при каждом взаимодействии дислокации с кластером.

Для исследования того, как медный кластер в алюминиевой матрице может влиять на движение растянутой полной краевой дислокации, проведены МД расчеты энергии дефекта упаковки в кристалле алюминия, который содержит наноразмерный медный кластер. Ранее аналогичный анализ был проведен в работе [99] - исследовалось упрочнение в процессе сдвиговой деформации от пар атомов Mg в матрице алюминия. На рисунке 4.13(в) показана зависимость энергии нестабильного дефекта упаковки $E_{НДУ}$ для системы, содержащей включения разного диаметра с концентрацией меди 50%. Увеличение диаметра включения приводит к увеличению значения $E_{НДУ}$. Величина дополнительной энергии, приходящейся на площадь включения $\Delta E_{включ}$, при этом уменьшается из-за более быстрого роста площади, чем увеличение энергии системы $E_{НДУ}$. На рисунке 4.13(г) показаны энергетические кривые дефекта упаковки для трех типов включений: 1) сферический кластер диаметром 2 нм с концентрацией атомов меди 50%; 2) полусфера, касающаяся секущую плоскость снизу; 3) полусфера, касающаяся секущую плоскость сверху. Из рисунка видно, что кривые демонстрируют практически идентичное поведение и дают одинаковые значения энергии дефекта упаковки. Рассчитанные зависимости энергии от смещения показаны на рисунке 4.13(а) как для чистого алюминия, так и для систем, содержащих включения с различной концентрацией атомов меди. Кривая обобщенного дефекта упаковки имеет два максимума, которые соответствуют энергии нестабильного дефекта упаковки (НДУ), и минимум между ними, соответствующим энергии устойчивого дефекта упаковки (УДУ). Для чистого алюминия полученное значение $E_{НДУ Al} = 188.6 \text{ мДж} \cdot \text{м}^{-2}$.

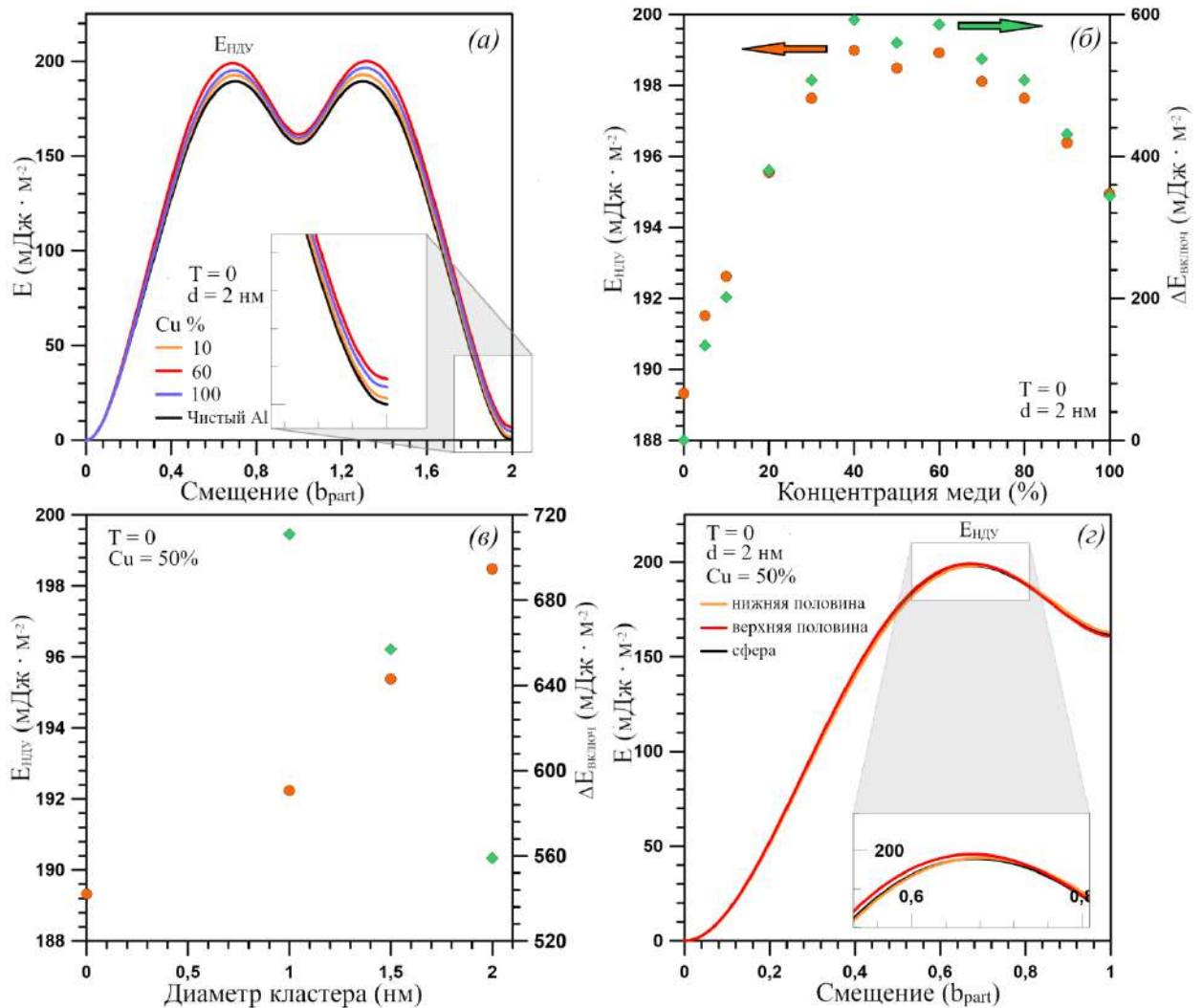


Рис. 4.13. (а) зависимость энергии обобщенного дефекта упаковки от смещения для чистого алюминия и кристалла алюминия, содержащего кластер с различной концентрацией атомов меди (диаметра кластер равен 2 нм). (б) энергия нестабильного дефекта упаковки системы (оранжевые кружки) и дополнительная энергия, относящаяся к области включения (зеленые ромбы), в зависимости от концентрации меди во включении (диаметр кластера 2 нм). (в) энергия нестабильного дефекта упаковки системы (оранжевые кружки) и дополнительная энергия, отнесенная к площади включения (зеленые ромбы), в зависимости от диаметра кластера (концентрация атомов меди во включении 50 %). (г) сравнение кривых обобщенного дефекта упаковки для сферического кластера и

полусферических кластеров, находящихся выше и ниже секущей плоскости (диаметр кластера 2 нм, при концентрации меди 50 ат. %).

4.2. Теоретическая модель взаимодействия дислокации с наноразмерным кластером меди

В этом разделе формулируется модель движения и взаимодействия дислокации с перерезаемым либо неперерезаемым включением – кластером атомов меди различного диаметра в кристалле алюминия. Теоретическая модель строится по схеме, предложенной в [105] и далее развитой в [68, 103]. В сформулированной модели учитывается кинетика перерезания включения и округлая форма линии дислокации вблизи препятствия, которая обеспечивает правильное значение силы, действующей на включение со стороны дислокационной линии и стремящейся перерезать включение.

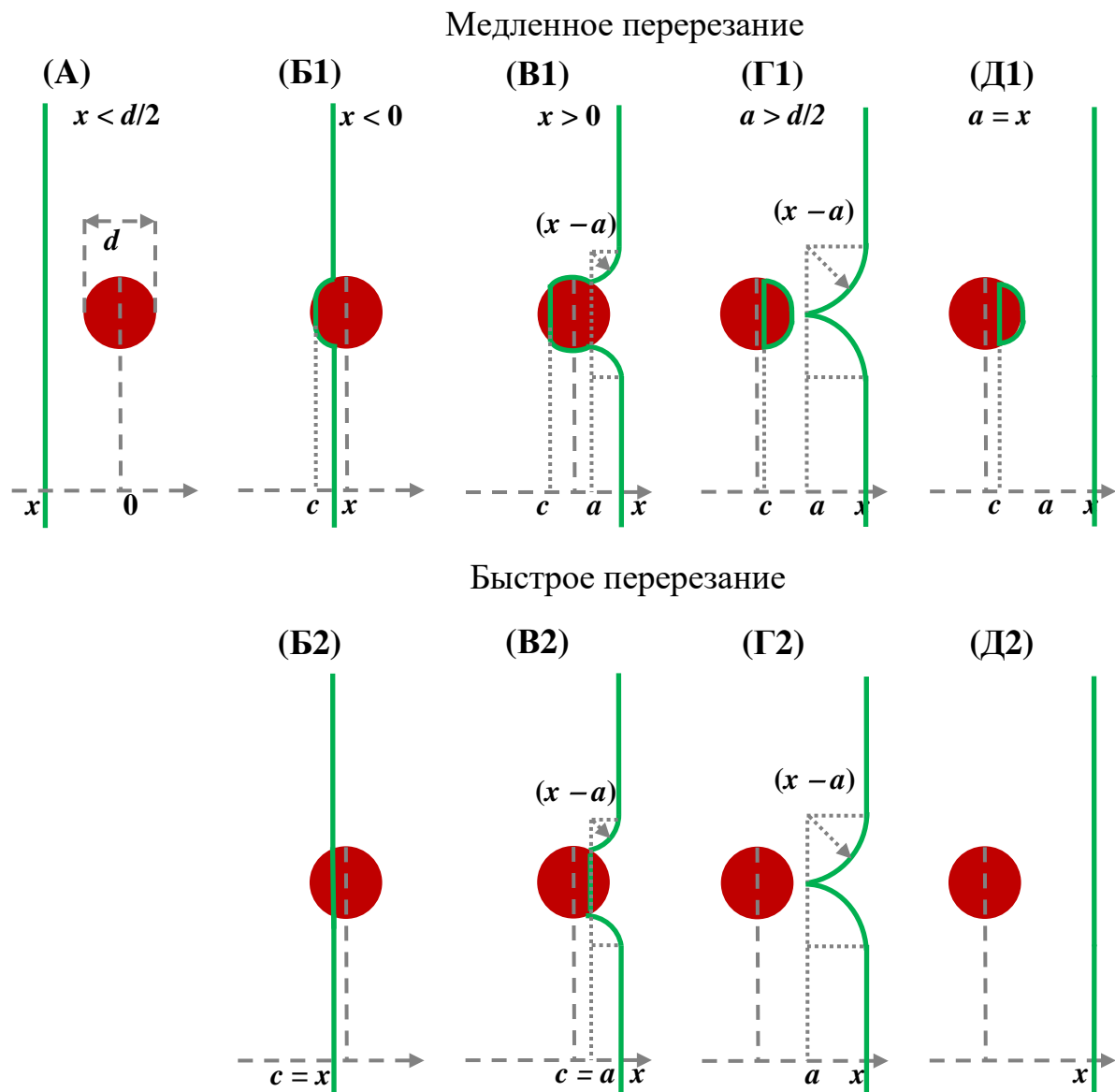


Рис. 4.14. Схема движения дислокации и взаимодействия с медным кластером: стадия (А) приближение дислокации к препятствию; стадия (Б) начало взаимодействия дислокации с кластером, когда основной сегмент дислокации не дошел до середины препятствия; стадия (В) завершающая стадия взаимодействия; этап (Г) стягивание к основной части дислокации её отстающих круговых сегментов после взаимодействия; стадия (Д) движение прямой дислокационной линии после взаимодействия. Этапы (Б1) - (Д1) соответствуют медленному перерезанию с образованием круговых дислокационных сегментов на поверхности кластера; предельный случай

означает отсутствие перерезания и обход кластера благодаря образованию петли Орована вокруг неперерезаемого включения. Этапы (В2) - (Д2) соответствуют случаю быстрого перерезания.

Схематическое изображение линии дислокации, и её взаимодействие с включением показано на рисунке 4.14. Краевая дислокация движется в положительном направлении оси X , и ее прямые участки имеют координату x . Кластер диаметром d расположен между точками $-d/2$ и $d/2$ по оси X и имеет круглое сечение в плоскости скольжения дислокации. Во время взаимодействия крайняя левая точка дислокации $c \in [-d/2, d/2]$ - это глубина перерезания включения: достижение $c = d/2$ означает завершение процесса перерезания, тогда как значение $c = -d/2$ соответствует случаю неперерезаемого включения. Предполагается, что дислокационная линия отделяется от кластера непосредственно в месте расположения прямых сегментов x на стадии (Б) до достижения центра препятствия $x < 0$. После преодоления центра $x \geq 0$, на этапе (В), линия дислокации отделяется от включения в точке с координатой $a \geq 0$ эта координата является дополнительной степенью свободы в системе. Эта же координата, a , определяет кривизну линии дислокации при стягивании отстающих сегментов к основной части дислокации на стадии (Г) после взаимодействия $a > d$. Во время взаимодействия и последующего выпрямления дислокации на этапах (Б), (В) и (Г) форма линии дислокации представлена тремя прямолинейными чисто краевыми сегментами и четырьмя круговыми сегментами. Внутри кластера движется один прямолинейный сегмент дислокации, обеспечивая его перерезание; оставшиеся два прямолинейных сегмента движутся в алюминиевой матрице. Два круговых сегмента вытянуты по поверхности кластера и имеют радиус $d/2$. Два других радиальных сегмента с радиусом $(x - a)$ закрепляются на включении на

стадии (В) и догоняют основную часть дислокации на стадии (Г). Этап (Д) соответствует состоянию, когда отставшие круговые сегменты после взаимодействия догнали прямолинейные сегменты, т.е. $a = x$. Перерезание может происходить путем сжатия оставшейся петли на включении после отделения основной линии дислокации - этапы (Г1) и (Д1) на рисунке 4.14. В целом динамика движения дислокации и взаимодействия с препятствием описывается тремя координатами x, c и a . Также возможно быстрое перерезание, обозначенное стадиями (Г2) - (Д2) на рисунке 4.14 без возникновения дополнительных круговых сегментов вдоль поверхности включения. В этом случае есть только две независимые координаты, описывающие систему на каждом из этапов.

В периодически повторяющейся системе, соответствующей постановке МД моделирования, расстояние между включениями есть D вдоль линии дислокации; L вдоль вектора Бюргерса, совпадающего с направлением движения краевой дислокации, и H в направлении, перпендикулярном плоскости скольжения.

Свободное движение прямой дислокационной линии до и после взаимодействия, то есть на стадиях (А) и (Д), описывается следующим уравнением движения [98]:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F_x \left(1 - \frac{1}{c_t^2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right)^{3/2} - B \left(\frac{dx}{dt} \right), \quad (4.1)$$

где m - масса покоя дислокации; B - коэффициент трения при малой скорости дислокации; c_t - поперечная скорость звука; F_x - сила со стороны упругих напряжений, действующих на единицу длины дислокационной линии.

Уравнение (4.1) учитывает квазирелятивистский рост собственной энергии и силы трения при приближении скорости дислокации к поперечной

скорости звука, что важно для быстрого сдвига. Барьер Пайерлса имеет низкое значение для ГЦК решетки; поэтому напряжением со стороны барьера можно пренебречь в уравнении (4.1). В работе [98] показано, что следует использовать локальные напряжения в окрестности дислокационной линии при расчете F_x :

$$F_x = b\sigma', \quad (4.2)$$

где b - модуль вектора Бюргерса, σ' - действующее напряжение.

Действующее напряжение в рассматриваемой периодической системе, под действием сдвига со скоростью u в момент времени t , рассчитывается аналогично случаю малоугловых границ зерен наклона в формулах (2.6) - (2.7) следующим образом:

$$\sigma' = \begin{cases} \frac{G}{H}(ut - Nb) - \frac{Gb}{2H}\left(\frac{x-x_0}{ab}\right), & (x - x_0) < ab, \\ \frac{G}{H}(ut - Nb) - \frac{Gb}{2H}\left(2 - \frac{L-(x-x_0)}{ab}\right), & (x - x_0) > L - ab, \\ \frac{G}{H}(ut - Nb) - \frac{Gb}{2H}, & \text{в других случаях,} \end{cases} \quad (4.3)$$

где x_0 - начальное положение дислокации, N - количество полных циклов движения дислокации по периодической системе, ab - размер действующей области вокруг ядра дислокации.

Уравнение (4.3) дает напряжение, усредненное по зоне, включающей слой толщины ab перед линией дислокации и аналогичный слой за линией дислокации. При этом среднее напряжение в системе составляет:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{G}{H}\left(ut - b\frac{S_D}{LD}\right), \quad (4.4)$$

где S_D - площадь, заметаемая дислокацией при ее движении.

Геометрическое рассмотрение дает следующие уравнения для значения заметаемой дислокацией площади на различных этапах взаимодействия:

$$S_D = \begin{cases} D(x - x_0) - (2 - \pi/2)(x - a)^2 + NLD, \text{ на стадиях (А), (Г), (Д),} \\ D(x - x_0) + S_{in}(c) - \pi d^2/4 + NLD, \text{ на стадии (Б),} \\ D(x - x_0) - (2 - \pi/2)(x - a)^2 - (x - a)\sqrt{d^2 - 4a^2} + S_{in}(c) - \\ - \pi d^2/4 + NLD, \text{ на стадии (В),} \end{cases} \quad (4.5)$$

где $S_{in}(c)$ – заматаемая дислокацией площадь внутри включения, определяемая координатой перерезания c . Данной площадью и полным поперечным сечением включения можно пренебречь как малыми величинами при вычислении среднего напряжения в уравнении (4.4), однако производную

$$\frac{\partial S_{in}}{\partial c} = \sqrt{d^2 - 4c^2}. \quad (4.6)$$

следует учитывать при расчете действующих сил. Следует положить $a = x$ в формуле (4.5) на этапах (А) и (Д).

Чтобы найти действующие силы, мы должны записать энергию дислокации, которая включает в себя как работу упругого поля $-S_D b \sigma'$, так и собственную энергию, которая пропорциональна длине линии дислокации. Краевые и винтовые сегменты имеют разную энергию на единицу длины [2], которую обозначим, как ε_e и ε_s , соответственно. Сегменты, идущие внутри кластера и разрезающие кластер, имеют другую энергию, обозначенную как ε_c . Предполагая, что круговые сегменты дислокации состоят из равных долей краевого и винтового типа, получаем следующее выражение для энергии рассматриваемого участка линии дислокации:

$$E_D = \begin{cases} -S_D b \sigma' + \varepsilon_e D + \frac{1}{2} [\pi \varepsilon_s - (4 - \pi) \varepsilon_e] (x - a), & \text{на стадии (А), (Г), (Д),} \\ -S_D b \sigma' + \varepsilon_e \left(D - \sqrt{d^2 - 4x^2} \right) + \\ + \varepsilon_s \left[\sqrt{d^2 - c^2} + \arcsin(2x/d) - \arcsin(2c/d) \right], & \text{на стадии (Б),} \\ -S_D b \sigma' + \varepsilon_e \left(D - \sqrt{d^2 - 4x^2} \right) + \frac{1}{2} [\pi \varepsilon_s - (4 - \pi) \varepsilon_e] (x - a) + \\ + \varepsilon_c \left[\sqrt{d^2 - c^2} + \arcsin(2x/d) - \arcsin(2c/d) \right], & \text{на стадии (В),} \end{cases} \quad (4.7)$$

где $a = x$ на этапах (А) и (Д).

Обобщенные силы, f_x , f_c и f_a , действующие на координаты, x , c и a , соответственно, рассчитываются следующим образом:

$$f_x = -\frac{\partial E_D}{\partial x}, \quad (4.8a)$$

$$f_a = -\frac{\partial E_D}{\partial a}, \quad (4.8б)$$

$$f_c = -\frac{\partial E_D}{\partial c} - \gamma L_c \cdot \text{sign} \left(\frac{dc}{dt} \right), \quad (4.8в)$$

где последний член в выражении для f_c есть сила сопротивления, связанная с преодолением дополнительных препятствий, создаваемых атомами меди на плоскости скольжения внутри включения. Хотя потенциальные силы можно вычислить как производные от энергии, эта сила сопротивления является диссипативной и направлена противоположно направлению движения дислокации в кластере. Перерезание не начинается пока первый упругий член в правой части уравнения (4.8в) не преодолеет силу сопротивления. Коэффициент γ с размерностью поверхностной энергии характеризует силу сопротивления; он должен быть пропорционален дополнительной энергии дефекта упаковки, возникающей из-за наличия атомов меди, что обсуждается в разделе 4.1.2. В случае быстрого перерезания на этапах (Б2) и (В2)

количество независимых переменных уменьшается, поскольку $c = x$ на этапе (Б2) и на этапе (В2):

$$f_x = - \left(\frac{\partial E_D}{\partial x} \right)_{c=x} - \gamma L_c \operatorname{sign} \left(\frac{dx}{dt} \right) \text{ на стадии (Б2)}, \quad (4.9)$$

$$f_c = - \left(\frac{\partial E_D}{\partial c} \right)_{a=c} - \gamma L_c \operatorname{sign} \left(\frac{dc}{dt} \right) \text{ на стадии (В2)}.$$

Эффективные длины сегментов дислокации, L_x, L_c и L_a , связанные с изменением координат, x, c и a , определяются через производные от заметенной площади:

$$L_x = \frac{\partial S_D}{\partial x} = \begin{cases} D - (4 - \pi)(x - a) \text{ на стадиях (А), (Г) и (Д)}, \\ D - \sqrt{d^2 - 4x^2} \text{ на стадии (Б1)}, \\ D \text{ на стадии (Б2)}, \\ D - (4 - \pi)(x - a) - \sqrt{d^2 - 4a^2} \text{ на стадии (В)}, \end{cases} \quad (4.10a)$$

$$L_c = \frac{\partial S_D}{\partial c} = \sqrt{d^2 - 4c^2}, \quad (4.10б)$$

$$L_a = \frac{\partial S_D}{\partial a} = \begin{cases} (4 - \pi)(x - a) + \frac{4a(x - a)}{\sqrt{d^2 - 4a^2}} \text{ на стадии (В)}, \\ (4 - \pi)(x - a) \text{ на стадии (Г)}. \end{cases} \quad (4.10в)$$

Таким образом, силы на единицу длины дислокационной линии равны:

$$F_x = \frac{f_x}{L_x}, F_c = \frac{f_c}{L_c}, F_a = \frac{f_a}{L_a}. \quad (4.11)$$

Выполняя дифференцирование, получаем:

$$F_x = \begin{cases} b\sigma' \text{ на стадиях (А) и (Д),} \\ b\sigma' - \frac{4\varepsilon_e x + 2\varepsilon_c d}{L_x \sqrt{d^2 - 4x^2}} \text{ на стадии (Б1),} \\ b\sigma' - \gamma \frac{\sqrt{d^2 - 4x^2}}{L_x} \text{sign}\left(\frac{dx}{dt}\right) \text{ на стадии (Б2),} \\ b\sigma' - \frac{1}{2L_x} [\pi\varepsilon_s - (4 - \pi)\varepsilon_e] \text{ на стадиях (В) и (Г),} \end{cases} \quad (4.12a)$$

$$F_c = \begin{cases} \frac{2\varepsilon_c}{d - 2c} + b\sigma' - \gamma \cdot \text{sign}\left(\frac{dc}{dt}\right) \text{ на стадиях от (Б1) до (Д1),} \\ \frac{1}{\sqrt{d^2 - 4c^2}} \left\{ \frac{1}{2} [\pi\varepsilon_s - (4 - \pi)\varepsilon_e] - \frac{4\varepsilon_e x + 2\varepsilon_c d}{\sqrt{d^2 - 4x^2}} + b\sigma' L_a \right\} - \\ - \gamma \cdot \text{sign}\left(\frac{dc}{dt}\right) \text{ на стадии (В2),} \end{cases} \quad (4.12б)$$

$$F_a = \begin{cases} \frac{1}{2(4 - \pi)(x - a)} \left\{ [\pi\varepsilon_s - (4 - \pi)\varepsilon_e] - \frac{4\varepsilon_e x + 2\varepsilon_c d}{\sqrt{d^2 - 4x^2}} \right\} + \\ + b\sigma' \text{ на стадии (В1),} \\ \frac{\pi\varepsilon_s - (4 - \pi)\varepsilon_e}{2(4 - \pi)(x - a)} + b\sigma' \text{ на стадии (Г),} \end{cases} \quad (4.12в)$$

на стадии (В2) в формуле (4.12б) предполагается, что вся сила прилагается к отрезку длиной $L_c = \sqrt{d^2 - 4c^2}$, разрезающему кластер, поскольку сопротивление здесь намного выше, чем в окружающей матрице.

Зная силу F_x , изменение координаты x определяется уравнением (4.1) на всех этапах. То же уравнение и коэффициенты используются для координаты a :

$$m \frac{d^2 a}{dt^2} = F_a \left(1 - \frac{1}{c_t^2} \left(\frac{da}{dt} \right)^2 \right)^{3/2} - B \left(\frac{da}{dt} \right). \quad (4.13)$$

Изменение этой координаты отражает движение свободных сегментов дислокации. Нет большой разницы между коэффициентом трения для краевых и винтовых сегментов [142]. Включение в основном имеет ту же решетку, что и окружающая алюминиевая матрица, но возникают

возмущения в узлах решетки из-за наличия атомов меди. Перерезание включения - это скольжение дислокации через него; данный процесс приводит к смещению одной половины кластера относительно другой. Для координаты перерезания c используем аналогичное уравнение движения, что и для других участков, но с другим, ожидаемо большим коэффициентом трения B_c , соответствующим движению дислокации в зоне сегрегации атомов меди:

$$m \frac{d^2c}{dt^2} = F_c \left(1 - \frac{1}{c_t^2} \left(\frac{dc}{dt} \right)^2 \right)^{3/2} - B \left(\frac{dc}{dt} \right). \quad (4.14)$$

Для простоты в формуле (4.14) используется та же масса покоя дислокации и предельная скорость, что и для алюминиевой матрицы. Поверхностный коэффициент сопротивления γ и коэффициент трения перерезания B_c являются параметрами модели перерезания, которые подгоняются по МД данным. В качестве альтернативы можно определить напряжение сопротивления как $\sigma_c = \gamma/b$ вместо поверхностного коэффициента γ . Как показано в МД моделировании, сдвиг или даже разделение кластера не меняет сопротивление движению дислокации, поскольку скольжению дислокации противодействует увеличенный энергетический барьер вследствие наличия атомов меди на плоскости скольжения. Таким образом, эволюция включения из-за перерезания в определенном приближении не влияет на взаимодействие дислокации с кластером и не учитывается в теоретической модели. С другой стороны, отслеживая координату перерезания c и вычисляя количество завершённых циклов перерезания, можно проследить эволюцию формы и размера кластера.

Чтобы замкнуть модель необходимо определить удельные энергии дислокаций. Основной вклад в силы дает энергия сегментов, находящихся

вблизи включения; поэтому используется диаметр включения как масштаб области локализации упругого поля дислокации, что приводит к следующим выражениям [2]:

$$\varepsilon_s = \frac{Gb^2}{4\pi} \left[1 + \ln \left(\frac{d}{b} \right) \right], \varepsilon_e = \frac{Gb^2}{4\pi} \left[1 + \frac{1}{1-\mu} \ln \left(\frac{d}{b} \right) \right], \quad (4.15a)$$

$$\varepsilon_c = \frac{Gb^2}{4\pi}, \quad (4.15b)$$

где $\mu = 0.357$ - коэффициент Пуассона. Энергии заданные в таком виде обеспечивают хорошее совпадение с данными МД моделирования в случае формирования петли Орована вокруг кластера.

Сформулирована полная модель, описывающая взаимодействие дислокации с перерезаемыми и неперерезаемыми включениями. Дифференциальные по времени уравнения - (4.1), (4.13) и (4.14) численно решаются явной схемой Эйлера. В численной реализации расстояния, близкие к нулю в знаменателях, заменяются величиной вектора Бюргерса в качестве характерного расстояния, которое ограничивает возможное расхождение сил в формулах (4.12). Помимо параметров материала, таких как G, μ, ρ, b , сформулированная модель имеет пять дополнительных параметров. Три параметра характеризуют чистый металл, а именно коэффициент трения B , коэффициент α размера действующей области ab и масса покоя дислокации m . Два параметра модели определяют кинетику перерезания включения: γ - поверхностный коэффициент сопротивления перерезанию, который может быть выражен как напряжение сопротивления $\sigma_c = \gamma/b$ и B_c - коэффициент трения при перерезании. Формирование петли Орована контролируется через энергии дислокаций в уравнениях (4.15), которые зависят только от параметров материала и размера кластера.

Рассмотрим сначала параметры материала. Коэффициент Пуассона взят из литературных данных - он входит только уравнения (4.15) и возможное отклонение значения этого параметра между литературными данными и использованным межатомным потенциалом существенно не влияет на результаты модели в целом. Другие материальные параметры напрямую определены для использованного межатомного потенциала в МД исследованиях [98] - данные температурные зависимости собраны в таблице 4.1. Масса покоя дислокации, также взята из работы [98].

Остальные параметры модели определяются с помощью байесовского алгоритма идентификации параметров. Для чистого металла - это коэффициент трения B и параметр размера области действующих напряжений α . Эти параметры определяются путем сравнения результатов теоретической модели с данными МД моделирования для нагружения чистого алюминия (постановка задачи деформации аналогична текущей, но в системе без медного кластера). Параметры перерезания включения, а именно, поверхностная энергия сопротивления перерезанию γ и коэффициент трения перерезания B_c согласованы с данными МД для системы с медным кластером диаметром 1 нм и концентрацией 50% атомов меди. Для этого использовалось сравнение среднего по объему сдвигового напряжения, уравнение (4.4), между теоретической моделью и результатами МД. Байесовский алгоритм означает случайную генерацию пар параметров в предполагаемом диапазоне и оценку квазивероятности каждой пары по соответствию временной зависимости среднего напряжения между результатами модели и МД данными. Сравнение проводится с шагом по времени вывода МД данных 0.1 пс до первых 500 пс эволюции системы; рассматриваются две кривые из МД расчетов – скорости сдвига 3 и 10 м/с (сравнение выполняется последовательно). Каждую итерацию по

байесовскому алгоритму новое значение квазивероятности вычисляется из предыдущего следующим образом:

$$p^{(n+1)} = p^{(n)} \exp \left[-0.1 \left(\frac{\langle \sigma \rangle^{MD} - \langle \sigma \rangle^{model}}{\Delta \sigma^{MD}} \right)^2 \right], \quad (4.16)$$

где верхние индексы «MD» и «model» означают МД данные и результаты теоретической модели, соответственно; $\Delta \sigma^{MD}$ - диапазон изменения напряжений в МД. Начальное значение квазивероятности задается как $p(0) = 1$. Префикс «квази» используется, потому что в уравнении (4.16) нет нормировки. Максимальное конечное значение квазивероятности определяет наиболее вероятный набор параметров. Рабочий набор параметров может быть произвольно выбран из области вокруг максимума. Байесовский алгоритм может работать с произвольным количеством параметров одновременно, но необходимое количество случайных наборов параметров и время расчета быстро возрастает с увеличением размерности пространства параметров. Поэтому в исследовании параметры разделяются на два набора - первая пара относится к чистому металлу, а вторая пара описывает перерезание включения.

4.3. Сравнение результатов теоретической модели взаимодействия дислокации с наноразмерным кластером меди с данными молекулярно-динамического моделирования

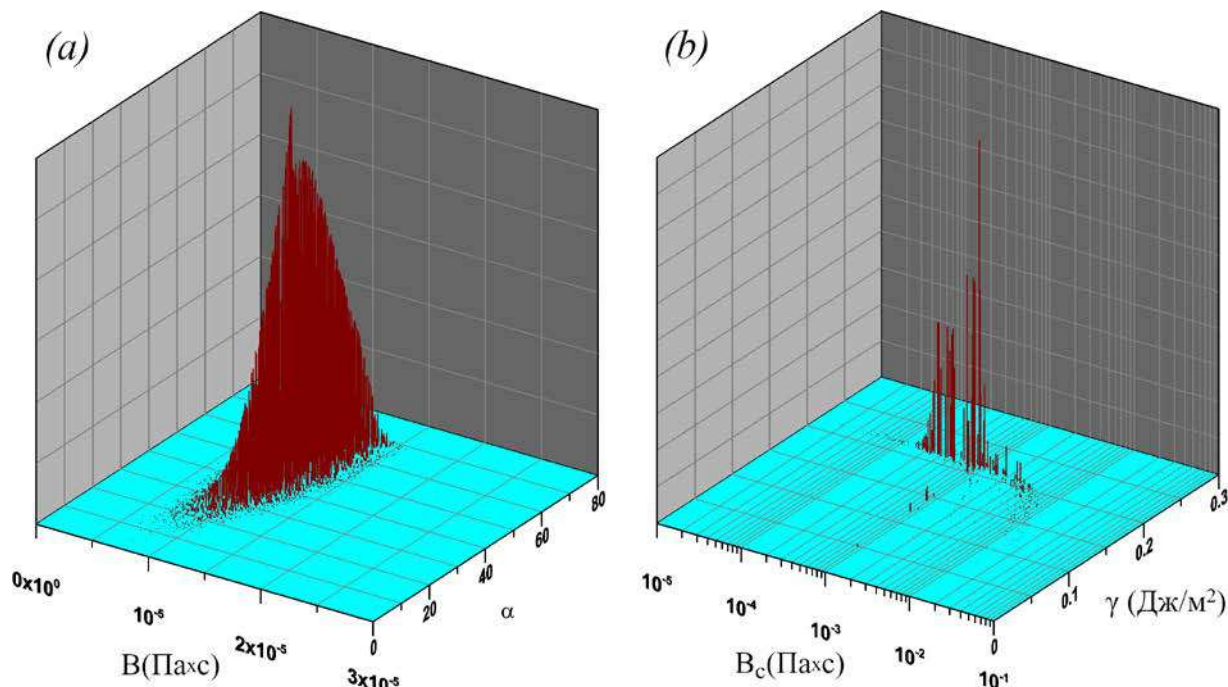


Рис. 4.15. Распределение квазивероятностей параметров теоретической модели в случае (а) движения дислокаций в чистом алюминии при 300 К и в (б) системе с перерезаемым медным включением диаметром 1 нм с 50% концентрацией атомов меди: результаты применения байесовского алгоритма.

Результат применения байесовского алгоритма для случая температуры 300 К показан на рисунке 4.15. Параметры изначально разыгрываются случайным образом в пределах диапазонов, показанных на этих графиках. Видны области высокой квазивероятности, что означает соответствие МД данным, в то время как большинство оцененных наборов параметров приводят к большому отклонению от МД расчетов. Примечательно, что области с высокой квазивероятностью образуют полосу, близкую к некоторому значению коэффициента трения B порядка 10^{-5} Па·с для случая чистого

алюминия, рисунок 4.15(а). Это означает, что данный параметр хорошо определен по используемым МД данным. С другой стороны, чувствительность ко второму параметру α намного слабее. В случае сплава, рисунок 4.15(б), видно полосу около значения коэффициента поверхностного сопротивления $\gamma = 210$ мДж/м² (напряжение сопротивления $\sigma_c = \gamma/b$ составляет около 730 МПа), в то время как коэффициент трения перерезания V_c может существенно варьироваться вокруг значения 10^{-3} Па \times с. Примечательно, что величина V_c внутри включения на два порядка выше, чем для чистого металла.

Используемые далее значения параметров, близкие к максимальной квазивероятности, собраны в таблице 4.2, а результаты сравнения теоретической модели с текущими параметрами и данными МД показаны на рисунке 4.16. Предложенная модель взаимодействия дислокации с включениями и перерезания включений позволяет адекватно описать упрочнение материала наноразмерными кластерами. Наибольшее отклонение между МД данными и результатами теоретической модели наблюдается при высокой скорости сдвига: модель предсказывает сглаженную кривую напряжения сдвига, в то время как МД моделирование показывает явные колебания. Это может быть связано с эффектом локализации поля напряжений вокруг дислокации при больших скоростях деформации, сравнимых с поперечной скоростью звука. Локализация должна уменьшать зону действия напряжений на дислокацию. Выбранное значение константы α приводит к завышению размера области, в которой вычисляется действующее напряжение σ' , что приводит к сглаживанию дислокационного движения по сравнению с МД расчетами. На рисунке 4.16(б) также сравниваются результаты модели с учётом перерезания и без него, что технически достигается увеличением параметра γ до критического уровня. Возможность перерезания кластера снижает уровень напряжений в системе,

поскольку нет необходимости в достижении напряжения сдвига, необходимого для замыкания петли Орована. С другой стороны, увеличение скорости деформации ослабляет эффект перерезания. Один и тот же шаг по времени в 1 фс используется как МД расчетах, так и в теоретическом моделировании.

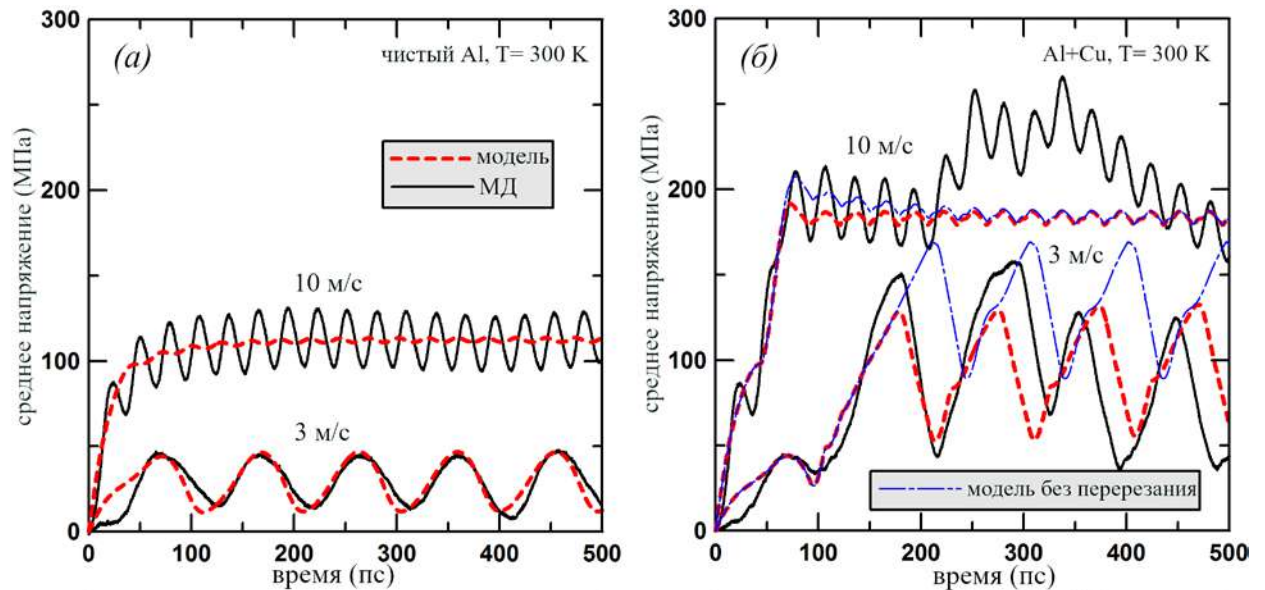


Рис. 4.16. Сравнение результатов МД и теоретической модели с параметрами, определенными байесовским алгоритмом: среднее напряжение сдвига в системе при 300 К для случая (а) чистого алюминия и (б) алюминия с кластером меди диаметром 1 нм и с концентрацией 50% атомов меди.

Таблица 4.1. Температурные зависимости параметров материала: модуль сдвига G , плотность вещества ρ и модуль вектора Бюргерса b для алюминия, рассчитанные для используемого межатомного потенциала [150]; температура указана в градусах Кельвина. В последних двух строках показаны температурные зависимости коэффициента трения B и коэффициента трения перерезания B_c , которые определены с использованием байесовской идентификации. Два оставшихся параметра модели, $\alpha = 50$ и $\gamma = 200$ мДж/м², могут рассматриваться как константы.

$G[\text{ГПа}] = 28.38 - 5.391 \times 10^{-3}T - 6.163 \times 10^{-6}T^2$
$\rho[\text{г/см}^3] = 2.638 - 1.015 \times 10^{-4}T$
$b[\text{нм}] = 0.2862 + 3.165 \times 10^{-6}T + 1.688 \times 10^{-9}T^2$
$B[\text{Па} \times \text{с}] = 0.23 \times 10^{-5} + 2.55 \times 10^{-8}T$
$B_c [\text{Па} \times \text{с}] = 0.06 \times T^{-0.7}$

На рисунке 4.17 показаны детали взаимодействия дислокации с медным кластером диаметром 1 нм, полученные из теоретической модели. Из уравнения (4.12б) видно, что сила перерезания минимальна в начале процесса при $c = -d/2$, а максимальный диаметр включения, подверженный перерезанию при нулевом напряжении $d = 2\varepsilon_c/\gamma$, составляет немного меньше 1 нм. Рост действующего напряжения сдвига σ_p увеличивает данный порог. На рисунках 4.17(а, б) показано напряжение сдвига σ_p , создаваемое дислокацией на включении, которое равно потенциальной части f_c (за исключением силы сопротивления), нормированной на величину вектора Бюргерса b . При низкой скорости смещения 3 м/с напряжение сдвига, действующее на включение со стороны дислокации σ_p , ниже уровня перерезания $\sigma_c = \gamma/b \approx 730$ МПа в начале каждого взаимодействия, рисунок 4.17(а), что приводит к первоначальной остановке дислокации и колебанию

скорости дислокации около нулевого значения - рисунок 4.17(в). Увеличение напряжения сдвига в системе приводит к увеличению напряжения на включении, рисунок 4.17(а), и быстрому его перерезанию, рисунок 4.17(д). При более высокой скорости смещения, равной 10 м/с, дислокация останавливается на кластере только при первом взаимодействии, рисунок 4.17(г), до тех пор, пока в системе не возрастет напряжение сдвига, вызывающее увеличение значения σ_p , что ведет к перерезанию, рисунок 4.17(б). Напряжение на включение превышает уровень перерезания при всех последующих взаимодействиях - поэтому дислокация немного замедляется, но не останавливается. Эта особенность взаимодействия, остановка дислокации при скорости 3 м/с и непрерывное прохождение кластера при скорости 10 м/с, за исключением первого взаимодействия, также наблюдается в результатах МД моделирования; разработанная теоретическая модель позволяет объяснить данные эффекты.

На рисунке 4.18 сравниваются результаты теоретической модели с данными МД для более крупных включений диаметром до 4 нм. В целом, модель адекватно отражает увеличение действующего напряжения с увеличением диаметра кластера. Примечательно, что и в МД, и в теоретической модели перерезание происходит только для включений диаметром 1.2 нм, в то время как петля Орована образуется вокруг более крупных включений, начиная с диаметра 1.4 нм. Адекватность сформулированной модели для крупных включений зависит от правильной структуры уравнений и выбора энергий дислокаций, уравнение (4.15а), а не от подгоночных параметров, который подбираются на основе результатов МД моделирования для включения размером 1 нм.

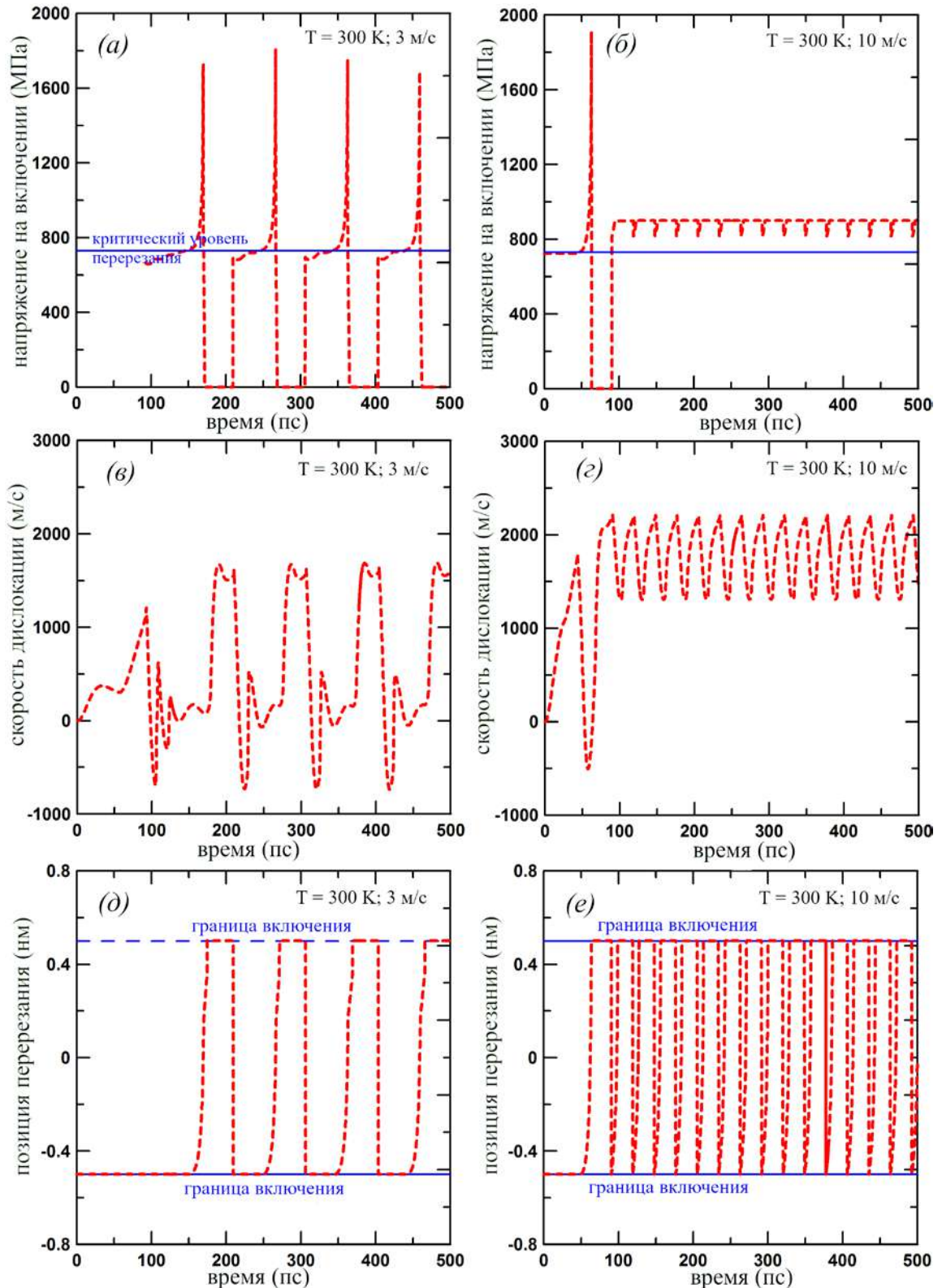


Рис. 4.17. Результаты расчетов теоретической модели взаимодействия краевой дислокации с наноразмерным включением: (а, б) напряжение сдвига σ_p , действующее на включение со стороны изогнутой части дислокационной

линии; (в, г) скорость прямолинейного сегмента дислокации dx/dt ; (д, е) координата перерезания s . Результаты представлены для системы с температурой 300 К и медным кластером диаметром 1 нм с концентрацией 50% атомов меди.

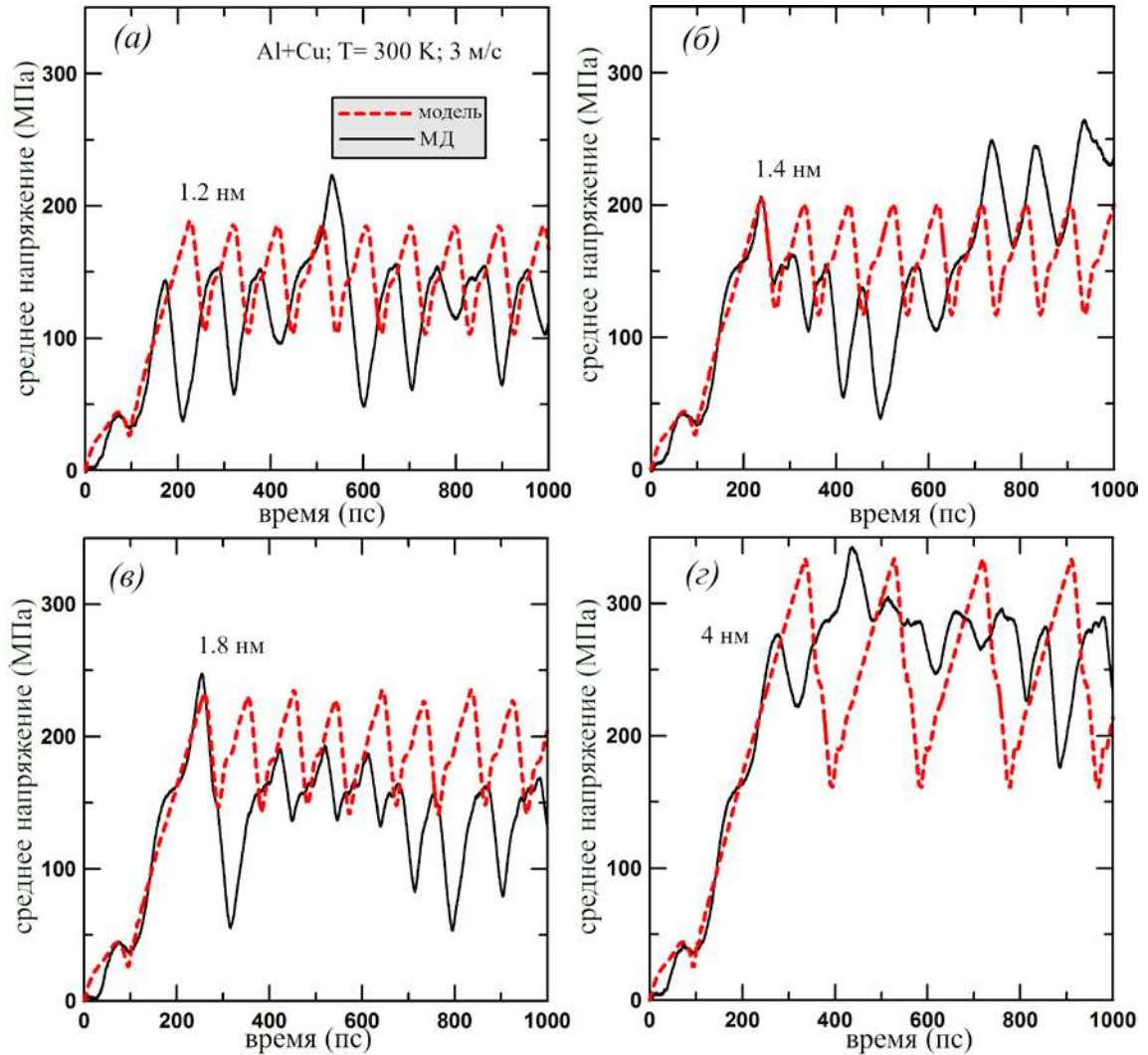


Рис. 4.18. Сравнение результатов теоретической модели и данных МД для кластеров разных размеров: среднее напряжение сдвига в системе при $T = 300$ К в алюминиевом кристалле, содержащем кластер с концентрацией 50% атомов меди. Диаметр включений: 1.2 нм (а), 1.4 нм (б), 1.8 нм (в) и 4 нм (г). Как в результатах МД, так и в теоретической модели перерезание происходит для включения диаметром 1.2 нм, а образование петли Орована наблюдается для кластеров диаметром 1.4 нм и больше.

Байесовская идентификация для поверхностной энергии сопротивления перерезанию γ и коэффициента трения перерезания B_c проводится также для температур 100, 500 и 700 К. Результаты для всех исследованных температур представлены на рисунке 4.19. Значения для температурной зависимости коэффициента трения дислокации B в чистом алюминии взяты из работы [98], в сочетании с определенным в настоящем исследовании значением коэффициента при комнатной температуре (таблица 4.2) дают линейную зависимость, представленную в таблице 4.1.

Полученная поверхностная энергия γ изменяется около постоянного уровня 200 мДж/м² - рисунок 4.20(б). На рисунке 4.20(б) также показана средняя избыточная поверхностная энергия включения [A4]. Эти энергии должны быть связаны, и последняя также демонстрирует отсутствие температурной зависимости с колебаниями около постоянного уровня 380 мДж/м².

Коэффициент трения перерезания B_c уменьшается с ростом температуры и может быть аппроксимирован степенной функцией от температуры - рисунок 4.20(а); эта функция представлена в таблице 4.1. Температурное поведение B_c сильно отличается от почти линейного увеличения с температурой B , что указывает на различную физическую природу этих двух видов трений. Несмотря на уменьшение значения B_c , разница в результатах между случаями 3 м/с и 10 м/с растет с температурой. Это связано с тем, что трение в чистом алюминии B , становится сильнее и замедляет движение дислокации между взаимодействиями, что особенно выражено при скорости сдвига 10 м/с. Для 3 м/с уровень напряжений уменьшается с температурой из-за уменьшения значения B_c .

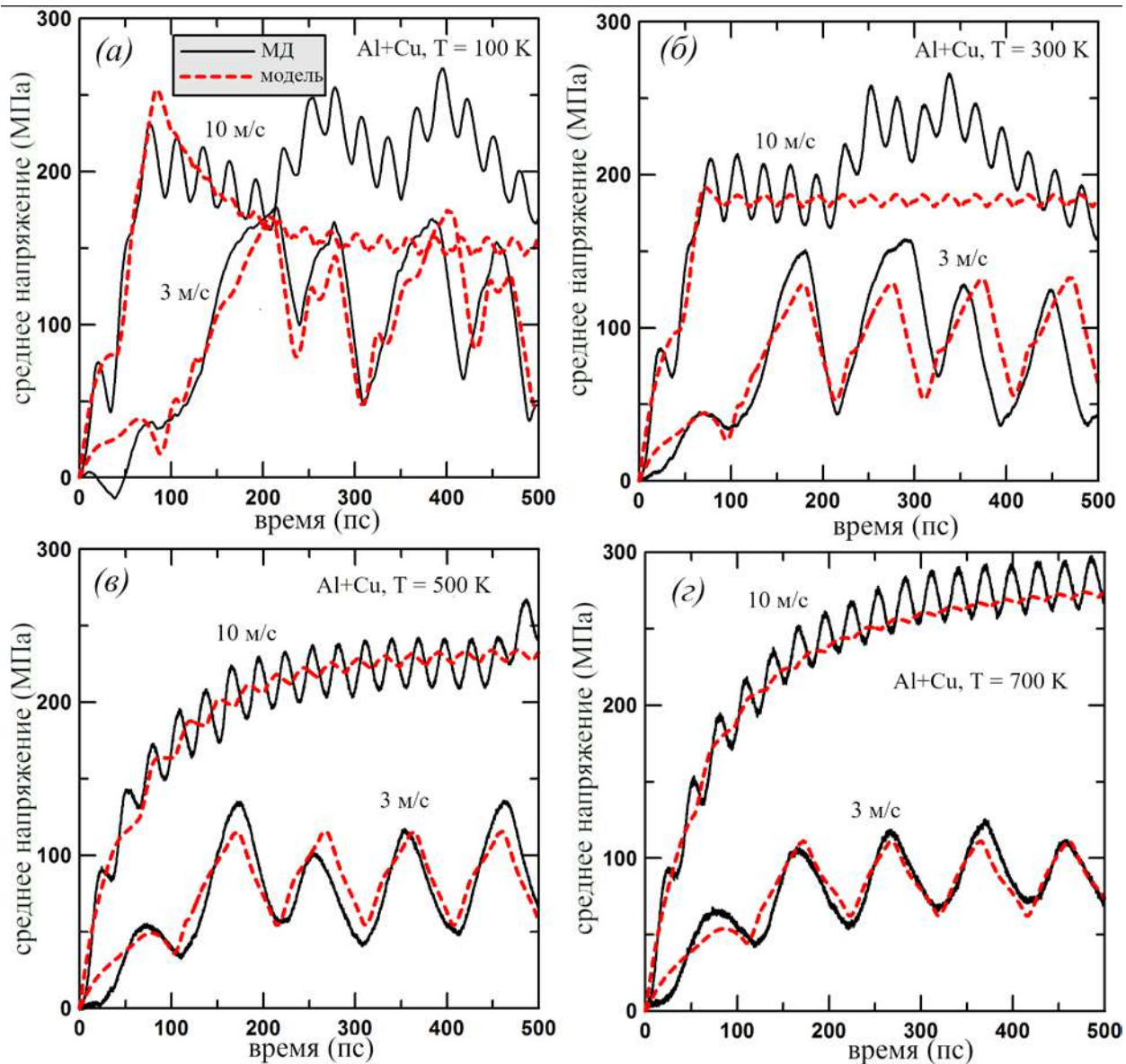


Рис. 4.19. Влияние температуры на перерезание медного кластера в теоретической модели. Рассматривается система с медным кластером диаметром 1 нм с концентрацией 50% атомов меди: (а) 100 К, (б) 300 К, (в) 500 К, (г) 700 К.

Таблица 4.2. Параметры теоретической модели движения дислокации в чистом алюминии, коэффициент трения B и размер действующей области напряжений αb , а также параметры модели перерезания в формуле (4.12), поверхностная энергия сопротивления перерезанию γ и коэффициент трения перерезания B_c ; параметры определены путем подгонки результатов модели к данным МД при температуре 300 К с помощью байесовского алгоритма.

Параметр	Значение
B [Па×с]	$1 \cdot 10^{-5}$
α	50
γ [мДж/м ²]	210
B_c [Па×с]	$0.9 \cdot 10^{-3}$

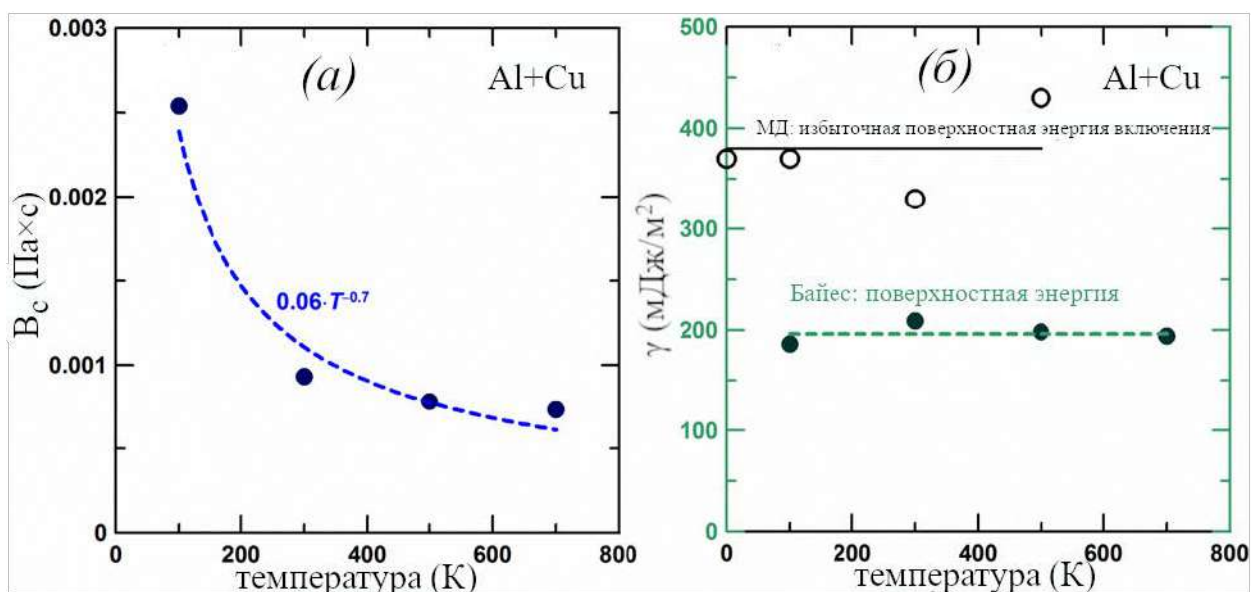


Рис. 4.20. Температурные зависимости: (а) коэффициента трения перерезания B_c , (б) поверхностной энергии перерезания γ . Символы показывают результаты Байесовской идентификации, а пунктирные линии их аппроксимацию.

4.4. Дискретная дислокационная динамика

Для оценки макроскопического отклика системы упрочненной наноразмерными медными кластерами сформулируем метод 2-х мерной дискретной дислокационной динамики (2D ДДД), который был изначально предложен в работе [68] для оценки макроскопического отклика алюминий-медного сплава с неперерезаемыми включениями типа θ -фазы. Следуя этому подходу и используя модель взаимодействия дислокаций с наноразмерным кластером, сформулированную в разделе 4.2, можно получить новую теоретическую модель 2D ДДД для случая перерезаемых наноразмерных медных кластерных включений.

Движение краевых дислокаций отслеживается в плоскости X - Y , перпендикулярной дислокационным линиям - рисунок 4.21(а). Рассмотрены две плоскости скольжения: первая параллельна оси X , а вторая параллельна оси Y . В реальных условиях нагружения наиболее типичная ситуация состоит в том, что только несколько систем скольжения участвуют в пластической деформации, а остальные системы неактивны из-за низких сдвиговых напряжений на этих плоскостях скольжения. Неактивные системы скольжения способствуют деформационному упрочнению, создавая препятствия для движущихся дислокаций, но в данной модели не рассматривается такой тип деформационного упрочнения. Учитываются только системы скольжения с максимальными сдвиговыми напряжениями на плоскости. Ортогональность является упрощающим приближением, поскольку реальные направления скольжения в ГЦК алюминии не ортогональны. Дислокации могут иметь как положительные, так и отрицательные знаки - это означает, что они могут двигаться в разных направлениях вдоль своих плоскостей скольжения при одном и том же приложенном сдвиговом напряжении, что также показано на рисунке 4.21(а). Каждая дислокация во время движения в кристалле алюминия может

контактировать с наноразмерными кластерами меди, которые образуют регулярные цепочки вдоль линии дислокации, ориентированной вдоль оси Z, рисунок 4.21(б). Разработанная в разделе 4.2 теоретическая модель используется для описания дислокационных взаимодействий и скорости дислокации. В 2D ДДД явно отслеживаются только положения прямолинейных краевых сегментов, а образующиеся круговые сегменты не учитываются явно, но их влияние содержится в модели, как описано в разделе 4.2.

Известно, что дислокации движутся под действием сдвиговых напряжений [2], которые возникают в процессе деформации – можно связать текущую деформацию с тензором напряжений при помощи обобщенного закона Гука [155]:

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= 2G(u_{xy} - w_{xy}), \\ \sigma_{xx} &= 2G[u_{xx} - (u_{xx} + u_{yy})/3 - w_{xx}] + K(u_{xx} + u_{yy}), \\ \sigma_{yy} &= 2G[u_{yy} - (u_{xx} + u_{yy})/3 - w_{yy}] + K(u_{xx} + u_{yy}),\end{aligned}\quad (4.17)$$

где K – модуль всестороннего сжатия, $w_{\alpha\beta}$ – тензор пластических деформаций, связанный с движением дислокаций, $u_{\alpha\beta}$ – тензор деформации решетки.

Тензор деформаций $u_{\alpha\beta}$ из (4.17) можно выразить через смещение узлов решетки u_α , пользуясь формализмом малых деформаций:

$$u_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right). \quad (4.18)$$

С другой стороны, смещения u_α и напряжения связаны следующими уравнениями движения:

$$\begin{aligned}\rho \frac{d^2 u_x}{dt^2} &= \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y}, \\ \rho \frac{d^2 u_y}{dt^2} &= \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y},\end{aligned}\quad (4.19)$$

где ρ - плотность вещества.

Определим тензор пластических деформаций $w_{\alpha\beta}$ путем суммирования вкладов всех дислокаций в расчетной области:

$$w_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_D} \left(n_{\alpha}^{(k)} b_{\beta}^{(k)} + n_{\beta}^{(k)} b_{\alpha}^{(k)} \right) \nu^{(k)} \delta(l^{(k)}), \quad (4.20)$$

где $\delta(l^{(k)})$ дельта-функция от аргумента $l^{(k)}$, которое представляет собой расстояние между точками, где рассчитывается пластическая деформация и следом k -й дислокации, $n_{\alpha}^{(k)}$ нормаль к плоскости скольжения и $b_{\alpha}^{(k)}$ - вектор Бюргера дислокаций в этой плоскости, $\nu^{(k)}$ - индикатор, определяющий знак дислокации (соответственно и направление скольжения).

Запишем изменение пластической деформации (4.20) со временем в дифференциальном виде. Учитывая, что знак дислокации определяет направление движения в плоскости скольжения (дислокации с противоположным знаком движутся в противоположные стороны), а векторы, $n_{\alpha}^{(k)}$ и $b_{\alpha}^{(k)}$ сонаправлены и ортогональны осям X и Y , получаем, что единственная ненулевая компонента тензора пластических деформаций w_{xy} определяется уравнением:

$$\frac{dw_{xy}}{dt} = \frac{b}{2} \sum_{k=1}^{N_D} s^{(k)} V_D^{(k)} \cdot \delta(x - x^{(k)}) \cdot \delta(y - y^{(k)}), \quad (4.21)$$

где $s^{(k)}$ - знак дислокации, $x^{(k)}$ и $y^{(k)}$ - текущие координаты дислокации, а скорость дислокации $V_D^{(k)}$, определяется по уравнению движения дислокационных сегментов из раздела 4.2.

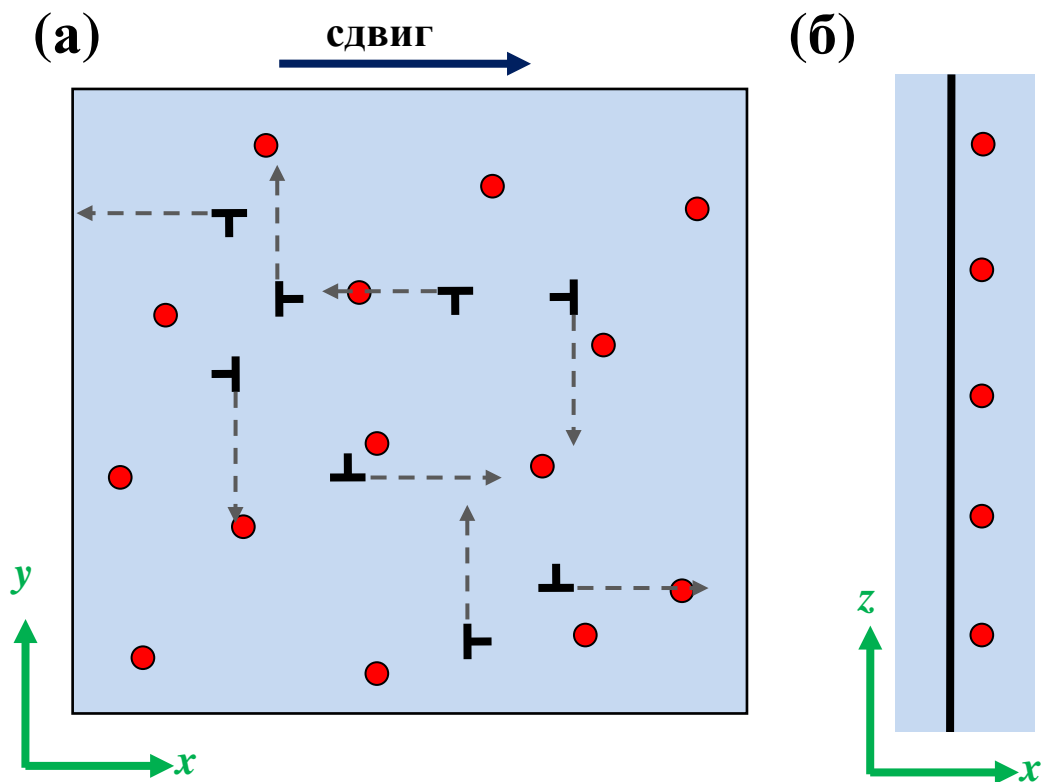


Рис. 4.21. Схема 2-мерной дискретной дислокационной динамики - дислокации взаимодействуют со случайно распределенными цепочками включений: (а) вид в плоскости $X-Y$, (б) вид в плоскости $X-Z$.

Область моделирования 10×10 мкм покрывается расчетной сеткой из 300×300 ячеек. При плотности дислокаций $\rho_D = 10^{14} m^{-2}$, характерной для ударно-деформированных металлов, каждый домен содержит 10000 дислокаций. В расчетах применяется скорость деформации $10^6 s^{-1}$, которая соответствует квазистационарному пределу, что было показано в работе [68]. Помимо локального распределения напряжений, используемого для определения движения дислокации, вычисляются средние по объему напряжения в области моделирования, соответственно, получается макроскопическая кривая напряжение-деформация.

На рисунке 4.22 показаны расчетные кривые деформации для кристалла алюминия, упрочненного наноразмерными медными кластерами, чистого алюминия и сравнение с экспериментальными данными [110] для алюминиевого сплава 2024 с содержанием меди 4.4 мас. % обработанного циклическим нагружением. В этих экспериментах наблюдалось образование содержащих медь наноразмерных кластеров с диаметром 1–2 нм. Моделируется тот же диапазон размеров кластеров с равномерным распределением в пределах этого диапазона. При заданном распределении по размерам концентрация включений пропорциональна массовому содержанию меди. Предполагается, что все атомы меди находятся в сферических кластерах с долей атомов меди внутри каждого включения 25%. В этом случае 1 мас. % меди эквивалентен 1.7% объемной доли медных включений и их численной плотности около $0.8 \times 10^{25} \text{ м}^{-3}$ при используемом распределении по размерам. Как показывают МД данные - включения с долей атомов меди более 20% создают практически одинаковое препятствие для движения дислокаций; следовательно, параметризованную модель можно использовать в этом диапазоне содержания меди. После быстрого роста упругих напряжений сдвига их величина стабилизируется за счет начала пластического течения, реализуемого скольжением дислокаций. Устанавливается баланс между захватом дислокаций наноразмерными кластерами и их освобождением: доля дислокаций, взаимодействующих с включениями, насыщается на уровне от 27% в случае 1.2 мас. % меди до 41% в случае 4.6 мас.%. Видно, что увеличение плотности включений приводит к увеличению напряжения течения, что позволяет дислокациям быстрее освобождаться с препятствий и поддерживать долю свободно движущихся дислокаций на приемлемом уровне.

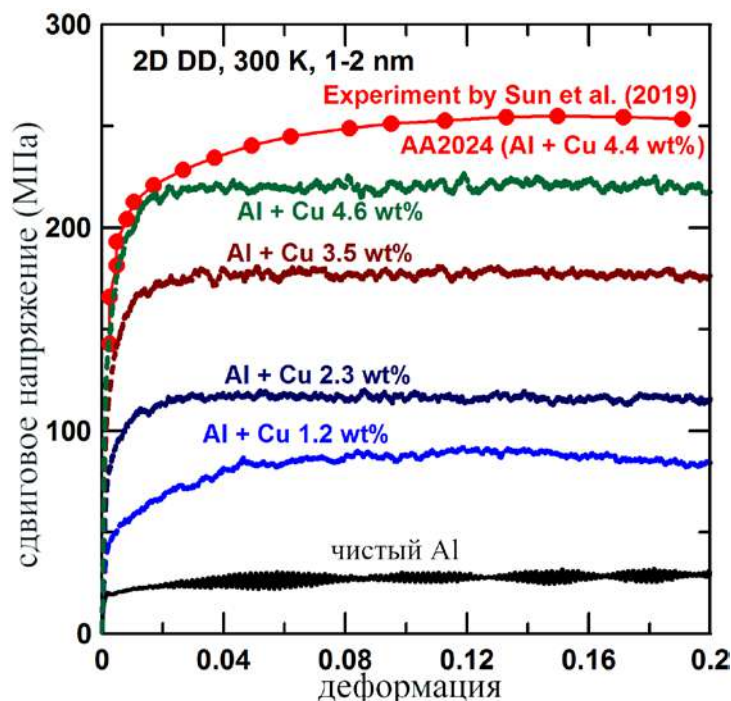


Рис. 4.22. Результаты 2D ДДД: кривые напряжение-деформация для алюминиевого сплава с медными наноразмерными включениями, равномерно распределенными по диаметрам от 1 до 2 нм; массовое содержание меди указано около кривых, концентрация атомов меди внутри каждого кластера составляет 25%. Линия с кружками представляет экспериментальные результаты [110] для алюминиевого сплава 2024 с содержанием меди 4.4 мас. %, обработанного циклическим нагружением, которое приводит к выделению кластеров растворенных веществ размером 1-2 нм.

Из данных рисунка 4.22 следует, что полученные результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными [110], хотя есть некоторая неопределенность в реальном распределении по размерам и содержанию атомов меди внутри кластеров в экспериментах. Дополнительное параметрическое исследование показывает, что, как и в случае θ -фазы, рассмотренной в работе [68], распределенные по размеру включения дают заметно более высокое напряжение течения, чем монодисперсные.

Напряжение течения зависит от конкретной формы распределения по размерам. Так как экспериментальная информация о виде распределения отсутствует, используется простейшее равномерное распределение и это приводит к значениям напряжения течения, которое в 2-3 раза больше, чем в случае монодисперсных наноразмерных кластеров. Хотя в работе [110] приводится кривая в координатах инженерная деформация-напряжение, сравнение полученных результатов с этой кривой приводится только для деформаций ниже 0.2, таким образом, разница в деформации не должна быть выше 10%, то же самое справедливо для напряжений.

Анализ пространственного распределения пластической деформации показывает существенно меньшую степень локализации пластического течения по сравнению с ранее исследованным случаем относительно крупных неперерезаемых включений типа θ -фазы [68]. В 2D ДДД пространственное распределение пластической деформации рассчитывается на расчетной сетке 300×300 ячеек, что дает всего 90 000 значений локальной пластической деформации. Анализ этого массива данных позволяет оценить степень локализации пластического течения. При приложенной деформации равной 0.1 стандартное отклонение пластической деформации составляет около 0.07 в случае θ -фазы с диаметром 130 нм, и только около 0.04 для наноразмерных медных кластеров (массовое содержание меди 4.6%). Соответствующие гистограммы локальной пластической деформации показаны на рисунке 4.23. Видно компактное распределение для случая малых медных кластеров и довольно широкое распределение с дополнительными максимумами, соответствующими полосам локализации, в случае крупных включений θ -фазы. Этот вывод также согласуется с экспериментальными результатами [110], которые показывают, что циклическое нагружение, приводящее к выделению из твердого раствора

кластеров размером 1-2 нм, подавляет локализацию пластического течения с сохранением приемлемой прочности сплава.

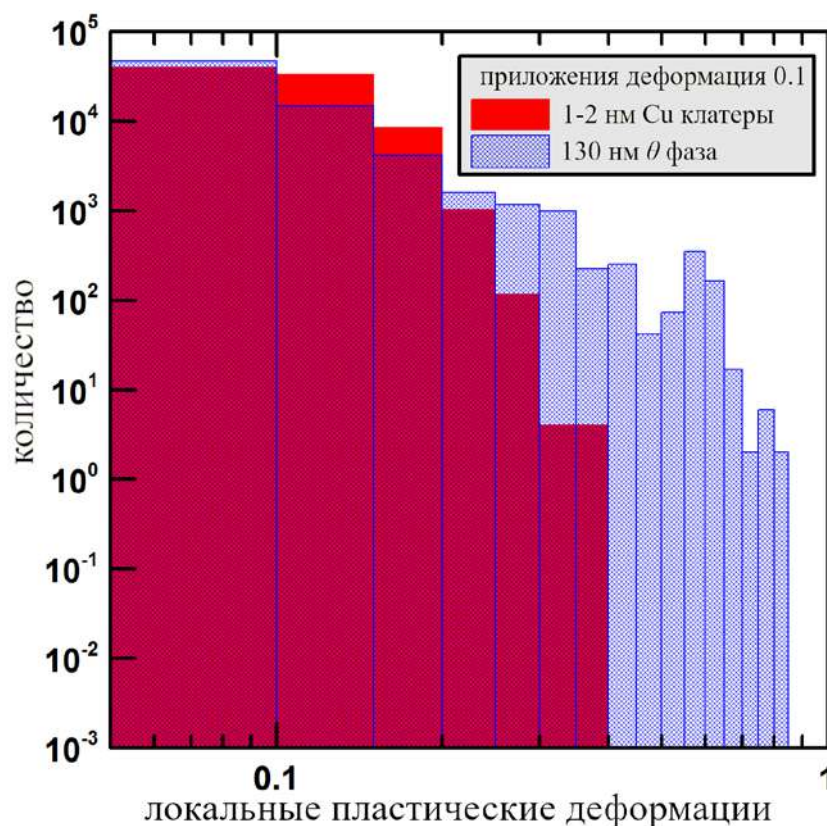


Рис. 4.23. Гистограммы значений локальных пластических деформации в логарифмических координатах: рассмотрены случаи включения θ -фазы диаметром 130 нм и медных кластеров размером 1-2 нм с массовым содержанием меди 4.6%.

Выводы по четвертой главе

В настоящей главе проведено исследование взаимодействия краевой дислокации с медными кластерами размером 1–4 нм в кристалле алюминия. Исследованные данного типа включения частично повторяют экспериментально полученные в работе [110] кластеры растворенных веществ размером 1-2 нм в алюминиевом сплаве, обработанном ультразвуковым динамическим циклическим нагружением. МД моделирование показывает, что основным механизмом преодоления

включения является его перерезание дислокацией в случае диаметра кластера до 1.2 нм и обход с помощью образования петли Орована для диаметра 1.4 нм и более. Альтернативным механизмом преодоления препятствия является переползание части дислокационной линии в соседнюю плоскость скольжения, что более вероятно при множественных взаимодействиях и усиливается с повышением температуры, но события переползания не оказывают существенного влияния на уровень напряжений в системе. Кроме того, анализ данных МД моделирования для различных концентраций атомов меди в кластере показывает, что упрочняющий эффект этого типа включения насыщается с увеличением концентрации: до 20% наблюдается увеличение напряжений, необходимых для преодоления препятствие, а при концентрациях более 20% напряжения выходят на стационарный уровень около 140 МПа. МД моделирование с различными конфигурациями кластеров также показывает интересные результаты: (1) моделирование МД системы с полусферическими кластерами, расположенными на разных расстояниях от плоскости скольжения дислокации показывает, что эффект упрочнения создается атомами меди на плоскости скольжения; (2) эффект сопротивления заключается в локальном возмущении кристаллической решетки атомами меди и быстро исчезает с увеличением расстояния между включением и плоскостью скольжения, таким образом, вклад упругого поля, создаваемого такими включениями в окружающем пространстве незначителен; (3) различное случайное расположение атомов во включении (при концентрации 50 ат.%) показывает, что данный тип включений в среднем создает одинаковый упрочняющий эффект независимо от расположения атомов в нем.

МД расчеты обобщенной энергии дефекта упаковки для систем с кластером показывают, что увеличение концентрации меди до 30% приводит к увеличению энергии нестабильного дефекта упаковки. В диапазоне 30–70%

начальное увеличение сменяется слабой зависимостью от концентрации меди. Дальнейшее увеличение содержания меди в кластере до 100% вызывает снижение энергии нестабильного дефекта упаковки. Предполагается, что тенденция к увеличению интенсивности химического взаимодействия атомов во включении с увеличением числа атомов меди при низких концентрациях в диапазоне от 0 до 30% сменяется тенденцией к уменьшению энергии при высоких концентрации атомов меди во включении более 70% из-за более низкого значения энергии дефекта упаковки меди по сравнению с алюминием.

На основе результатов МД моделирования разработана теоретическая модель взаимодействия дислокаций как с перерезаемыми, так и с неперерезаемыми включениями. Согласование теоретической модели с МД данными происходит с помощью Байесовской идентификации параметров. Согласно модели, дислокация изгибается вокруг включения и изогнутая линия дислокации стремится замкнуть петлю Орована. В тоже время сегменты, идущие вдоль поверхности включения, тянут краевой сегмент, проходящий через кластер и разрезающий его. Одновременность и конкуренция этих двух процессов определяет динамический отклик системы на деформацию сдвига.

Сформулированная теоретическая модель взаимодействия дислокаций как с перерезаемыми, так и с неперерезаемыми включениями соответствуют положению № 4 выносимому на защиту.

Теоретическая модель взаимодействия дислокации с наноразмерным медным кластером встроена в 2-мерную дискретную дислокационную динамику, что позволяет оценить макроскопический механический отклик такого сплава путем усреднения по области, содержащей тысячи дислокационных линий. Результаты 2D ДДД моделирования показывают, что увеличение плотности включений и их размера приводит к увеличению

напряжения течения, что ожидаемо. Кроме того, включения с распределением по размерам обладают более сильным упрочняющим эффектом по сравнению с монодисперсными включениями сопоставимого размера. Результаты расчетов дислокационной динамики согласуются с экспериментальными данными [110] для алюминиевого сплава 2024, обработанного циклическим нагружением. Анализ пространственного распределения пластической деформации показывает существенно меньшую степень локализации пластического течения по сравнению с ранее исследованным случаем относительно крупных неперерезаемых включений θ -фазы [68]. Этот вывод также согласуется с экспериментальными результатами [110], которые показывают, что циклическое упрочнение, приводящее к выделению кластеров растворенных веществ размером 1-2 нм, подавляет локализацию пластического потока.

Результаты 2D ДДД соответствуют положению № 5 выносимому на защиту.

Заключение

В диссертационной работе (1) сделан обзор по теоретическим представлениям пластичности и дефектам кристаллической структуры в металлах и сплавах и методам атомистического моделирования металлов; (2) проведены численные МД эксперименты движения малоугловых границ зерен в чистых ГЦК металлах и в твердом растворе атомов меди в алюминиевой матрице и движения уединенной краевой дислокации в кристалле алюминия с твердым раствором атомов меди; (3) сформулированы теоретические модели движения малоугловых ГЗ наклона в чистых ГЦК металлах и в кристалле алюминия с твердым раствором атомов меди, перечисленные теоретические модели разрабатывались на основе данных численных МД экспериментов; (4) исследовалась пластичность алюминиевого сплава, упрочненного наноразмерными медными кластерами, путем разработки теоретической модели взаимодействия дислокации с кластером, которая параметризовалась на данных численного МД эксперимента, проведено сравнение с экспериментальными данными результатов 2D ДДД моделирования, основанного на предложенной теоретической модели.

Исследовано движение малоугловых ГЗ наклона в чистых ГЦК металлах. Разработана теоретическая модель движения, которая основана на данных МД моделирования. В МД моделировании ГЗ движется как набор полных краевых дислокаций. Показано, что коэффициент трения зернограничных полных краевых дислокаций в случае бикристаллов на порядок выше, чем в монокристаллах. Полные дислокации, составляющие малоугловые ГЗ наклона, движутся без расщепления, в то время как уединенная полная дислокация в ГЦК монокристалле движется как пара растянутых дислокаций Шокли, что более энергетически выгодно. Теоретическая модель позволяет описать основные стадии движения ГЗ в

соответствии с распределением локальных напряжений в кристалле, и изменение формы границы в процессе движения, обусловленное дислокационными взаимодействиями. Все перечисленные эффекты наблюдаются в численном МД эксперименте, и теоретическая модель дает хорошее качественное и количественное соответствие. На основе теоретической модели проведено исследование с различными скоростями деформации и размерами зерен, определена стадия быстрого движения ГЗ, которая наблюдается как в динамическом, так и в квазистатическом режиме и связана с неравномерным распределением локальных напряжений в кристалле.

Исследовано движение уединенной краевой дислокации и малоугловых ГЗ наклона в твердом растворе атомов меди. Так как движущаяся дислокация находится в постоянном контакте с твердым раствором, то происходит замедление дислокации, что справедливо как для уединенной дислокации, так и для зернограничных дислокации. В системе с уединенной дислокацией средние напряжения значительно возрастают, также как и порог начала движения границ зерен (предел текучести). Теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона, основанная на данных представлениях, дает приемлемое соответствие с численным МД экспериментом.

В четвертой главе рассмотрена пластичность алюминиево-медного сплава, упрочненного наноразмерными медными кластерами, что соответствует экспериментально полученному в [110] сплаву. Для этого был поставлен численный МД эксперимент по взаимодействию уединенной дислокации с наноразмерным кластером. Данные МД моделирования использовались для разработки теоретической модели перерезания/обхода кластера. Обобщенная в 2D ДДД предложенная теоретическая модель показывает хорошее соответствие с экспериментальными данными по полученным кривым напряжение-деформация.

Список публикаций автора по теме диссертации

Статьи в изданиях из списка ВАК и приравненных к ним

A1. Алфёрова, Е.А. Пластическая деформация [001]-монокристаллов никеля. Моделирование и эксперимент / Е.А. Алфёрова, Е.В. Фомин // Журнал технической физики, – 2019. – Т. 89. Вып. 1. – С. 112–119.

A2. Fomin, E.V. Interaction of edge dislocation with copper atoms in an aluminum crystal / E.V. Fomin, V.S. Krasnikov // Journal of Physics: Conference Series. –2020. – V. 1556. – P. 012050.

A3. Fomin, E.V. Slip of low-angle tilt grain boundary (110) in FCC metals at perpendicular shear / E.V. Fomin, A.E. Mayer // International Journal of Plasticity. – 2020. – V. 134. – P. 102843.

A4. Fomin, E.V. Prediction of shear strength of cluster-strengthened aluminum with multi-scale approach describing transition from cutting to bypass of precipitates by dislocations / E.V. Fomin, A.E. Mayer, V.S. Krasnikov // International Journal of Plasticity. – 2021. – V. 146. – P. 103095.

A5. Грачева, Н.А. Применение нейронных сетей для моделирования ударно-волновых процессов в алюминии / Н.А. Грачева, М.В. Леканов, А.Е. Майер, Е.В. Фомин // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2021. – № 3. – С. 42–61.

Тезисы и статьи в сборниках трудов и докладов международных и всероссийских научных конференций

1. Актуальные проблемы прочности : LIX Международная конференция (Тольятти, 5–8 сентября 2017 года) : сборник материалов и конкурсных докладов / отв. ред. А.Ю. Виноградов, Д.Л. Мерсон. – Тольятти : Изд-во ТГУ, 2017. – 334 с.

2. XXXIII International Conference on Equations of State for Matter. Book of Abstracts / – Moscow & Chernogolovka & Nalchik, 2018. – p. 334.

3. Механика и моделирование материалов и технологий. Сборник трудов Секции Международной молодёжной научной конференции «XLIV Гагаринские чтения» (17-20 апреля 2018) / Москва: ИПМех РАН, 2018. – 182 с.
4. XXXIV International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. Book of Abstracts / – Moscow & Chernogolovka & Nalchik, 2018. – p. 397.
5. Перспективные материалы и технологии: материалы международного симпозиума, Минск, 23 - 27 августа 2021 г. / под. ред. В.В. Рубаника - Минск: Белорусский государственный институт стандартизации и сертификации», 2021. – 475 с.

Список сокращений

МД – молекулярная динамика

ДДД – дискретная дислокационная динамика

2D ДДД – двумерная дискретная дислокационная динамика

NPT – ансамбль с постоянным числом частиц, постоянным давлением и постоянной температурой

NVT – ансамбль с постоянным числом частиц, постоянным объемом и постоянной температурой

EAM – межатомный потенциал основанный на модели погружённого атома

ADP – межатомный потенциал основанный на модели погружённого атома с угловой зависимостью

ГЗ – граница зерен

ГЦК – гранецентрированная кубическая решетка

Список литературы

1. Трусов, П.В. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения / П.В. Трусов, А.И. Швейкин // – Н.: Изд-во СО РАН, 2019. – 605 с.
2. Hirth, J.P. Theory of Dislocations / J.P. Hirth, J. Lothe // – second ed. –N.–Y.: Wiley, 1982.
3. McDowell, D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity / D.L. McDowell // International Journal of Plasticity. – 2010. – V. 26. – P. 1280–1309
4. Lim, H. Simulation of polycrystal deformation with grain and grain boundary effects / H. Lim, M.G. Lee, J.H. Kim, B.L. Adams, R.H. Wagoner // International Journal of Plasticity. – 2011. – V. 27. – Iss. 9. – P. 1328–1354.
5. Xiong, L. Coarse-grained atomistic simulations of dislocations in Al, Ni and Cu crystals / L., Xiong, Q. Deng, G.J. Tucker, D.L. McDowell, Y. Chen // International Journal of Plasticity. – 2012. – V. 38. – P. 86–101.
6. Han, S. A hypothetical dislocation well model for kinematic hardening in cyclic plasticity / S. Han, D. Shi, X. Yang, J. Huang, Y. Sun // International Journal of Plasticity. – 2018. – V. 110. – P. 220–247.
7. Zhang, L. A review on atomistic simulation of grain boundary behaviors in face-centered cubic metals / L. Zhang, C. Lu, K. Tieu // Computational Materials Science. – 2016. – V. 118. – P. 180–191.
8. Fribourg, G. Microstructure-based modelling of isotropic and kinematic strain hardening in a precipitation-hardened aluminium alloy / G. Fribourg, Y. Brechet, A. Deschamps, A. Simar, // Acta Materialia. – 2011. – V. 59. –P. 3621–3635.
9. Anjabin, N. Constitutive Modeling of Hot Deformation Behavior of the AA6063 Alloy with Different Precipitates / N. Anjabin, A.K. Taheri, H.S. Kim // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2013. – V. 44. – P. 5853–5860

10. de Vaucorbeil, A. The superposition of strengthening contributions in engineering alloys / A. de Vaucorbeil, W.J. Poole, C.W. Sinclair // *Materials Science and Engineering: A*. – 2013. – V. 582. – P. 147–154.
11. Bardel, D. Cyclic behaviour of a 6061 aluminium alloy: Coupling precipitation and elastoplastic modeling / D. Bardel, M. Perez, D. Nelias, S. Dancette, P. Chaudeta, V. Massardier // *Acta Materialia*. – 2015. – V. 83. – P. 256–268.
12. Anjabin, N. Modeling the Anisotropic Flow Behavior of Precipitate-Hardened Al–Cu Alloys During Plane Strain Compression / N. Anjabin // *Metals and Materials International*. – 2019. – V. 25. – P. 159–167.
13. Li, Y. Experimental investigation and modelling of yield strength and work hardening behaviour of artificially aged Al-Cu-Li alloy / Y. Li, Z. Shi, J. Lin // *Materials & Design*. – 2019. – V. 183. – P. 108121.
14. Bellon, B. An analysis of the influence of the precipitate type on the mechanical behavior of Al - Cu alloys by means of micropillar compression tests / B. Bellon, S. Haouala, J. LLorca, // *Acta Materialia*. – 2020. – V. 194. – P. 207–223.
15. Chen, X. Study on tensile/compressive asymmetry in creep ageing behavior of Al–Cu alloy under different stress levels / X. Chen, L. Zhan, Z. Ma, Y. Xu, Q. Zheng, Y. Cai // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2020. – V. 843. – P. 156157.
16. Ji, K. A Constitutive Model for Yield Strength and Work Hardening Behaviour of Aluminium Alloys during Artificial Ageing / K. Ji, G. Li, Y. Sun, J. Xu, H. Chen, K. Chen, Y. Zhu, Y. Li // *Metals*. – 2020. – V. 10. – P. 1094.
17. Li, Y.L. A new crystal plasticity constitutive model for simulating precipitation-hardenable aluminum alloys / Y.L. Li, C.P. Kohar, R.K. Mishra, K. Inal // *International Journal of Plasticity*. – 2020. – V. 132. – P. 102759.

18. Zhou, P. Using novel strain aging kinetics models to determine the effect of solution temperature on critical strain of Al-Zn-Mg-Cu alloy / P. Zhou, Y. Song, L. Hu, J. Lin, J. Lu // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2020. – V. 838. – P. 155647.
19. Bahl, S. Aging behavior and strengthening mechanisms of coarsening resistant metastable θ' precipitates in an Al-Cu alloy / S. Bahl, L. Xiong, L.F. Allard, R.A. Michi, J.D. Poplawsky, A.C. Chuang, D. Singh, T.R. Watkins, D. Shin, J.A. Haynes, A. Shyam // *Materials & Design*. – 2021. – V. 198. – P. 109378.
20. Lim, A.T. Low-angle grain boundary migration in the presence of extrinsic dislocations / A.T. Lim, D.J. Srolovitz, M. Haataja // *Acta Materialia*. – 2009. – V. 57. – Iss. 17. – P. 5013–5022.
21. Wulfinghoff, S. A gradient plasticity grain boundary yield theory / S. Wulfinghoff, E. Bayerschen, T. Bohlke // *International Journal of Plasticity*. – 2013. – V. 51. – P. 33–46.
22. Zhang, C. Effect of realistic 3D microstructure in crystal plasticity finite element analysis of polycrystalline Ti-5Al-2.5Sn / C. Zhang, H. Li, P. Eisenlohr, W. Liu, C.J. Boehlert, M.A. Crimp, T.R. Bieler // *International Journal of Plasticity*. – 2015. – V. 69. – P. 21–35.
23. Rubio, R.A. Grain boundary strengthening of FCC polycrystals / R.A. Rubio, S. Haouala, J. LLorca // *Journal of Materials Research*. – 2019. – V. 34. – Iss. 13. – P. 2263–2274.
24. Schulz, K. A mesoscale continuum approach of dislocation dynamics and the approximation by a Runge-Kutta discontinuous Galerkin method / K. Schulz, L. Wagner, C. Wieners, // *International Journal of Plasticity*. – 2019. – V. 120. – P. 248–261.
25. Borodin, E.N. Coupled model for grain rotation, dislocation plasticity and grain boundary sliding in fine-grained solids / E.N. Borodin, A.E. Mayer,

M.Yu. Gutkin // // International Journal of Plasticity. – 2020. – V. 134. – P. 102776.

26. Gutkin, M.Yu. Strengthening and softening mechanisms in nanocrystalline materials exhibiting superplasticity / M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // Proc. SPIE 6253, Ninth International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations. – 2006. – P. 62530J.

27. Shveykin, A. Statistical Crystal Plasticity Model Advanced for Grain Boundary Sliding Description / A. Shveykin, P. Trusov, E. Sharifullina // Crystals. – 2020. – V. 10. – P. 822.

28. Bobylev, S.V. Partial and split dislocation configurations in nanocrystalline metals / S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // Physical Review B. – 2006. – V. 73. – P. 064102.

29. Read, W.T. Dislocation models of crystal grain boundaries / W.T. Read, W. Shockley // Physical Review. – 1950. – V. 78. – P. 275–289.

30. Brown, J.A. Structure and motion of junctions between coherent and incoherent twin boundaries in copper / J.A. Brown, N.M. Ghoniem // Acta Materialia. – 2009. – V. 57. – Iss. 15. – P. 4454–4462.

31. Tucker, G.J. Non-equilibrium grain boundary structure and inelastic deformation using atomistic simulations / G.J. Tucker, D.L. McDowell // International Journal of Plasticity. – 2011. – V. 27. – Iss. 6. – P. 841–857.

32. Shan, D. Effect of the $\Sigma 5(310)/[001]_{\Theta} = 53.1^{\circ}$ grain boundary on the incipient yield of bicrystal copper: a quasicontinuum simulation and nanoindentation experiment / D. Shan, L. Wang, L. Yuan, // Journal of Materials Research. – 2013. – V. 28. – Iss. 5. – P. 766–773.

33. Peron-Lühns, V. Quasicontinuum study of the shear behavior of defective tilt grain boundaries in Cu / V. Peron-Lühns, F. Sansoz, L. Noels // Acta Materialia. – 2014. – 64. – P. 419–428.

34. Winther, G. Low-Energy Dislocation Structure (LEDS) character of dislocation boundaries aligned with slip planes in rolled aluminium / Winther, C.S. Hong, X. Huang // *Philosophical Magazine*. – 2015. – V. 95. – Iss. 13. – P. 1471–1489.
35. Burbery, N.J. Modelling with variable atomic structure: dislocation nucleation from symmetric tilt grain boundaries in aluminium / N.J. Burbery, R. Das, W.G. Ferguson // *Computational Materials Science*. – 2015. – V. 101. – P. 16–28.
36. Burbery, N.J. Thermo-kinetic mechanisms for grain boundary structure multiplicity, thermal instability and defect interactions / N.J. Burbery, R. Das, W.G. Ferguson // *Materials Chemistry and Physics*. – 2016. – V. 179. – P. 254–265.
37. Burbery, N.J. Transitional grain boundary structures and the influence on thermal, mechanical and energy properties from molecular dynamics simulations / N.J. Burbery, R. Das, W.G. Ferguson // *Acta Materialia*. – 2016. – V. 108. – P. 355–366.
38. Wyman, R.D. Variability of non-Schmid effects in grain boundary dislocation nucleation criteria / R.D. Wyman, D.T. Fullwood, R.H. Wagoner, E.R. Homer // *Acta Materialia*. – 2017. – V. 124. – P. 588–597.
39. Zhang, L. Energy of low angle grain boundaries based on continuum dislocation structure / L. Zhang, Y. Gu, Y. Xiang // *Acta Materialia*. 2017. 126, 11–24.
40. Sun, X.Y. Disconnections, dislocations and generalized disclinations in grain boundary ledges / X.Y. Sun, C. Fressengeas, V. Taupin, P. Cordier, N. Combe // *International Journal of Plasticity*. – 2018. – V. 104. – P. 134–146.
41. Wang, W. Grain boundary inter-connections in polycrystalline aluminum with random orientation / W. Wang, C. Cai, G.S. Rohrer, X. Gu, Y. Lin, S. Chen, P. Dai // *Materials Characterization*. – 2018. – V. 144. – P. 411–423.

42. Patala, S. Understanding grain boundaries – the role of crystallography, structural descriptors and machine learning / S. Patala // *Computational Materials Science*. – 2019. – V. 162. – P. 281–294.
43. Olmsted, D.L. Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals: I. Grain boundary energy / D.L. Olmsted, S.M. Foiles, E.A. Holm // – 2009. – *Acta Materialia*. – V. 57. – Iss. 13. – P. 3694–3703.
44. Tschopp, M.A. Symmetric and asymmetric tilt grain boundary structure and energy in Cu and Al (and transferability to other fcc metals) / M.A. Tschopp, S.P. Coleman, D.L. McDowell // *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*. – 2015. – V. 4. – P. 176–189.
45. Admal, N.C. A unified framework for polycrystal plasticity with grain boundary evolution / N.C. Admal, G. Po, J. Marian, // *International Journal of Plasticity*. – 2018. – V. 106. – P. 1–30.
46. Gutkin, M. Yu. Grain boundary migration as rotational deformation mode in nanocrystalline materials / M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Applied Physics Letters*. – 2005. – V. 87. – P. 251916.
47. Dynkina, N.K. Migration of grain boundaries in free-standing nanocrystalline thin films / N.K. Dynkina, M.Yu. Gutkin // *Scripta Materialia*. – 2012. – V. 66. – P. 73–76.
48. Olmsted, D.L. Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals—II: grain boundary mobility / D.L. Olmsted, E.A. Holm, S.M. Foiles // *Acta Materialia*. – 2009. – V. 57. – Iss. 13. – P. 3704–3713.
49. Cleja-Tigoiu, S. Disclination based model of grain boundary in crystalline materials with microstructural defects / S. Cleja-Tigoiu, R. Pascan, V. Tigoiu // *International Journal of Plasticity*. – 2019. – V. 114. – P. 227–251.
50. Tiwari, S. The effect of hydrostatic pressure on the shear deformation of Cu symmetric tilt interfaces / S. Tiwari, G.J. Tucker, D.L. McDowell // *International Journal of Plasticity*. – 2019. – V. 118. –P. 87–104.

51. Alfeyorova, E.A., Plastic strain of nickel [001] single crystals: simulation and experiment / E.A. Alfeyorova, E.V. Fomin // *Technical Physics*. – 2019. – V. 64. – P. 92–99.
52. Yanilkin, A.V. Dynamics and kinetics of dislocations in Al and Al–Cu alloy under dynamic loading / A.V. Yanilkin, V.S. Krasnikov, A.Yu. Kuksin, A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2014. – V. 55. – P. 94–107.
53. Krasnikov, V.S. Plastic deformation under high-rate loading: the multiscale approach / V.S. Krasnikov, A.Yu. Kuksin, A.E. Mayer, A.V. Yanilkin // *Physics of the Solid State*. – 2010. – V. 52. – P. 1386–1396.
54. Pouriayevali, H. Decomposition of dislocation densities at grain boundary in a finite-deformation gradient crystal-plasticity framework / H. Pouriayevali, B.-X. Xu // *International Journal of Plasticity*. – 2017. – V. 96. – P. 36–55.
55. Haouala, S. Effect of slip transmission at grain boundaries in Al bicrystals / S. Haouala, R. Alizadeh, T.R. Bieler, J. Segurado, J. LLorca, // *International Journal of Plasticity*. – 2020. – V. 126. – P. 102600.
56. Williams, J.C. Progress in structural materials for aerospace systems / J.C. Williams, E.A. Starke Jr. // *Acta Materialia*. – 2003. – V. 51. – P. 5775–5799.
57. Casem, D.T. Shock and mechanical response of 2139-T8 aluminum / D.T. Casem, D.P. Dandekar // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – V. 111. – P. 063508.
58. Bryukhanov, I.A. Dynamics of edge dislocation in Cu–Ni solid solution alloys at atomic scale / I.A. Bryukhanov // *International Journal of Plasticity*. – 2020. – V. 135. – P. 102834.
59. Bryukhanov, I.A. Shear stress relaxation through the motion of edge dislocations in Cu and Cu–Ni solid solution: A molecular dynamics and discrete dislocation study / I.A. Bryukhanov, V.A. Emelyanov // *Computational Materials Science*. – 2022. – V. 201. – P. 110885.

60. Singh, C.V. Mechanisms of Guinier–Preston zone hardening in the athermal limit / C.V. Singh, D.H. Warner // *Acta Materialia*. – 2010. – V. 58. – P. 579–5805.
61. Gerold, V. On the structures of Guinier-Preston zones in Al single bond Cu alloys introductory paper / V. Gerold // *Scripta Metall.* – 1988. – V. 22. – P. 927.
62. Starink, M.J. Mechanisms of combined GP zone and θ' precipitation in an Al-Cu alloy / M.J. Starink, A.-M. Zahra // *J. Mater. Sci. Lett.* – 1997. – V. 16. – P. 1613–1615.
63. Ma, Z. Stress-level-dependency and bimodal precipitation behaviors during creep ageing of Al-Cu alloy: Experiments and modeling / Z. Ma, L. Zhan, C. Liu, L. Xu, Y. Xu, P. Ma, J. Li // *International Journal of Plasticity*. – 2018. – V. 110. – P. 183–201.
64. Zuiko, I. Effect of plastic deformation on the ageing behaviour of an Al–Cu–Mg alloy with a high Cu/Mg ratio / I. Zuiko, R. Kaibyshev // *Mater. Sci. Eng. A* – 2018. – 737. – P. 401–412.
65. Lumley, R.N. Interrupted aging and secondary precipitation in aluminium alloys / R.N. Lumley, I.J. Polmear, A.J. Morton // *Materials Science and Technology*. – 2003. – V. 19. – P.1483–1490.
66. Ma, P.P. Mechanical properties enhanced by deformation-modified precipitation of θ' -phase approximants in an Al-Cu alloy / P.P. Ma, C.H. Liu, C.L. Wu, L.M. Liu, J.H. Chen // *Materials Science and Engineering: A*. – 2016. – V. 676. – P. 138–145.
67. Zuiko, I. Ageing response of cold-rolled Al–Cu–Mg alloy / I. Zuiko, R. Kaibyshev // *Mater. Sci. Eng. A*. – 2020. – V. 781. – P. 139148.
68. Krasnikov, V.S. Prediction of the shear strength of aluminum with θ phase inclusions based on precipitate statistics, dislocation and molecular

dynamics / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer, V.V Pogorelko // International Journal of Plasticity. – 2020. – V.128. – P. 102672.

69. Dake, J.M. Direct observation of grain rotations during coarsening of a semisolid Al–Cu alloy / J.M. Dake, J. Oddershede, H.O. Sørensen, T. Werz, J.C. Shatto, K. Uesugi, S. Schmidt, C.E. Krill III // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2016. – V. 113. – V. 41. – P. E5998–E6006.

70. Harris, K.E. Grain rotation in thin films of gold / K.E. Harris, V.V. Sing, A.H. King // Acta Materialia. – 1998. – V. 46. – Iss. 8. – P. 2623–2633.

71. Thomas, S.L. Reconciling grain growth and shear-coupled grain boundary migration / S.L. Thomas, K. Chen, J. Han, P.K. Purohit, D.J. Srolovitz // Nature Communications. – 2017. – V. 8. – P. 1764.

72. Gutkin, M.Yu. Dynamics of Formation of Low-Angle Tilt Boundaries in Metals and Alloys at High Loading Rates / M.Yu. Gutkin, E.A. Rzhavtsev // Physics of the Solid State. – 2015. – V. 57. – №. 12. – P. 2447–2457.

73. Cahn, J.W. Duality of dislocation content of grain boundaries / J.W. Cahn, Y. Mishin, A. Suzuki // Philosophical Magazine. – 2006. – V. 86. – P. 3965–3980.

74. Viswanathan, R. Kinetics of grain boundary migration in copper bicrystals with [001] rotation / R. Viswanathan, C.L. Bauer // Acta Metallurgica. – 1973. – V. 21. – Iss. 8. – P. 1099–1109.

75. Bauer, C.L. Mechanisms for grain boundary migration / C.L. Bauer // Defect and Diffusion Forum. – 1991. – V. 66–69. – P. 749–764.

76. Winning, M. Stress induced grain boundary motion / M. Winning, G. Gottstein, L.S. Shvindlerman // Acta Materialia. – 2001. – V. 49. – Iss. 2. – P. 211–219.

77. Winning, M. Motion of $\langle 1\ 0\ 0 \rangle$ -tilt grain boundaries / M. Winning // Acta Materialia. – 2003. – V. 51. – Iss. 20. – P. 6465–6475.

78. Molodov, D.A. Low angle tilt boundary migration coupled to shear deformation / D.A. Molodov, V.A. Ivanov, G. Gottstein // *Acta Materialia*. – 2007. – V. 55. – Iss. 5. – P. 1843–1848.
79. Brandenburg, J.-E. On shear coupled migration of low angle grain boundaries / J.-E. Brandenburg, D.A. Molodov // *Scripta Materialia*. – 2019. – V. 163. – P. 96–100.
80. Schonfelder, B. Atomistic simulations of grain boundary migration in copper / B. Schonfelder, G. Gottstein, L.S. Shvindlerman // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2006. – V. 37. – P. 1757–1771.
81. Ovid'ko, I.A. Effects of incoherent nanoinclusions on stress-driven migration of low-angle grain boundaries in nanocomposites / I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Journal of Materials Science*. – 2015. – V. 50. – P. 4430–4439.
82. Guo, Y. Effects of a disconnection dipole on the shear-coupled grain boundary migration / Y. Guo, J. Wang, Z. Wang, J. Li, Y. Yang, Y. Zhou // *Computational Materials Science*. – 2015. – V. 109. – P. 253–257.
83. Gu, Y. Self-healing of low angle grain boundaries by vacancy diffusion and dislocation climb / Y. Gu, Y. Xiang, D.J. Srolovitz, J.A. El-Awady // *Scripta Materialia*. – 2018. – V. 155. – P. 155–159.
84. Warner, D.H. Effect of normal loading on grain boundary migration and sliding in copper / D.H. Warner, J.F. Molinari // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2008. – V. 16. – P. 075007.s
85. Khater, H.A. The disconnection mechanism of coupled migration and shear at grain boundaries / H.A. Khater, A. Serra, R.C. Pond, J.P. Hirth // *Acta Materialia*. – 2012. – V. 60. – Iss. 5. – P. 2007–2020.
86. Ivanov, V.A. Dynamics of grain boundary motion coupled to shear deformation: an analytical model and its verification by molecular dynamics / V.A. Ivanov, Y. Mishin // *Physical Review B*. – 2008. – V. 78. – P. 064106.

87. Prieto-Depedro, M. An atomistically informed kinetic Monte Carlo model of grain boundary motion coupled to shear deformation / M. Prieto-Depedro, I. Martin-Bragado, J. Segurado // *International Journal of Plasticity*. – 2015. – V. 68. – P. 98–110.
88. Rajabzadeh, A. The role of disconnections in deformation-coupled grain boundary migration / A. Rajabzadeh, F. Momprou, S. Lartigue-Korinek, N. Combe, M. Legros, D.A. Molodov // *Acta Materialia*. – 2014. – V. 77. – P. 223–235.
89. Murayama, M. Microstructure of two-phase Al–1.7 at% Cu alloy deformed by equal-channel angular pressing / M. Murayama, Z. Horita, K. Hono // *Acta Materialia*. – 2001. – V. 49. – P. 21–29.
90. da Costa Teixeira, J. The effect of shear-resistant, plate-shaped precipitates on the work hardening of Al alloys: Towards a prediction of the strength–elongation correlation / J. da Costa Teixeira, L. Bourgeois, C.W. Sinclair, C.R. Hutchinson // *Acta Materialia*. – 2009. – V. 57. – P. 6075–6089.
91. Liu, Z. On strain-induced dissolution of θ' and θ particles in Al–Cu binary alloy during equal channel angular pressing / Z. Liu, S. Bai, X. Zhou, Y. Gu // *Materials Science and Engineering: A*. – 2011. – V. 528. – P. 2217–2222.
92. Dobromyslov, A.V. Effect of spherically converging shock waves on the phase and structural states of the artificially aged Al-4 wt % Cu alloy / A.V. Dobromyslov, N.I. Taluts, A.N. Uksusnikov, E.A. Kozlov // *Physics of Metals and Metallography*. – 2012. – V. 113. – P. 418–425.
93. Da-xiang, S. Evolution of θ' precipitate in aluminum alloy 2519A impacted by split Hopkinson bar / S. Da-xiang, Z. Xin-ming, Y. Ling-ying, G. Gang, J. Hai-chun, G. Xing-hui // *Materials Science and Engineering: A*. – 2015. – V. 620. – P. 241–245.
94. Chung, T.F. Morphological evolution of GP zones and nanometer-sized precipitates in the AA2050 aluminium alloy / T.F. Chung, Y.L. Yang, C.N.

Hsiao, W.C. Li, B.M. Huang, C.S. Tsao, Z. Shi, J. Lin, P.E. Fischione, T. Ohmura, J.R. Yang, // *International Journal of Lightweight Materials and Manufacture*. – 2018. – V. 1. – P. 142–156.

95. Olasumboye, A.T. Dynamic response and microstructure evolution of AA2219-T4 and AA2219-T6 Aluminum Alloys / A.T. Olasumboye, G.M. Owolabi, A.G. Odeshi, A. Zeytinci, N. Yilmaz // *Journal of Dynamic Behavior of Materials*. –2018. – V. 4. –P. 151.

96. Kaira, C.S. Exploring novel deformation mechanisms in aluminum–copper alloys using in situ 4D nanomechanical testing / C.S. Kaira, T.J. Stannard, V. De Andrade, F. De Carlo, N. Chawla // *Acta Materialia*. – 2019. – V. 176. – P. 242–249.

97. Verestek, W. Molecular dynamics investigations of the strengthening of Al-Cu alloys during thermal ageing / W. Verestek, A.P. Prskalo, M. Hummel, P. Binkele, S. Schmauder // *Physical Mesomechanics*. – 2017. – V. 20. –P. 291–304.

98. Krasnikov, V.S., Mayer, A.E., Influence of local stresses on motion of edge dislocation in aluminum / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2018. – V. 101. – P. 170–187.

99. de Vaucorbeil, A. Atomistic insights into cluster strengthening in aluminum alloys / A. de Vaucorbeil, C.W. Sinclair, W.J. Poole // *Materialia*. – 2018. –V. 4. – P. 566–574.

100. Adlakha, I. Revealing the atomistic nature of dislocation-precipitate interactions in Al-Cu alloys. J / I. Adlakha, P. Garg, K.N. Solanki // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2019. – V. 797. – P. 325–333.

101. Esteban-Manzanares, G. An atomistic investigation of the interaction of dislocations with Guinier-Preston zones in Al-Cu alloys / G. Esteban-Manzanares, E. Martínez, J. Segurado, L. Capolungo, J. LLorca // *Acta Materialia*. – 2019. – V. 162. – P. 189–201.

102. Zhang, P. Plate-like precipitate effects on plasticity of Al-Cu micro-pillar: {100}-interfacial slip / P. Zhang, J.J. Bian, C. Yang, J.Y. Zhang, G. Liu, J. Weiss, J. Sun // *Materialia*. – 2019. – V. 7. – P. 100416.

103. Krasnikov, V.S. Interaction of dislocation with GP zones or θ'' phase precipitates in aluminum: Atomistic simulations and dislocation dynamics / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer, V.V. Pogorelko, F.T. Latypov, A.A Ebel // *International Journal of Plasticity*. – 2020. – V. 125. – P. 169–190.

104. Wu, B. Atomistic mechanism and probability determination of the cutting of Guinier-Preston zones by edge dislocations in dilute Al-Cu alloys / B. Wu, Z. Bai, A. Misra, Y., Fan // *Physical Review Materials*. – 2020. – V. 4. – P. 020601.

105. Krasnikov, V.S. Dislocation dynamics in aluminum containing θ' phase: Atomistic simulation and continuum modeling / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2019. – V. 119. – P. 21–42.

106. Saroukhani, S. Investigating dislocation motion through a field of solutes with atomistic simulations and reaction rate theory / S. Saroukhani, D.H. Warner // *Acta Materialia*. 2017. – V. 128. – P. 77–86.

107. Varvenne, C. Solute strengthening in random alloys / C. Varvenne, G.P.M. Leyson, M. Ghazisaeidi, W.A. Curtin // *Acta Materialia*. – 2017. – V. 124. – P. 660–683.

108. Leyson, G.P.M. Solute strengthening from first principles and application to aluminum alloys. / G.P.M. Leyson, L.G. Hector Jr., W.A. Curtin // *Acta Materialia*. 2012. 60, 3873–3884.

109. Hu, Y. Modeling peak-aged precipitate strengthening in Al–Mg–Si alloys / Y. Hu, W.A. Curtin // *J. Mech. Phys. Solids* 2021. 151, 104378.

110. Sun, W. Precipitation strengthening of aluminum alloys by room-temperature cyclic plasticity / W. Sun, Y. Zhu, R. Marceau, L. Wang, Q. Zhang, X. Gao, C. Hutchinson // *Science*. – 2019. – V. 363. – P. 972–975.

111. Zhang, Q. Training high-strength aluminum alloys to withstand fatigue / Q. Zhang, Y. Zhu, Y. Wu, C. Hutchinson // *Nature Communications*. – 2020. – V. 11. – P. 519.

112. Chen, H. Experimental and modelling assessment of ductility in a precipitation hardening AlMgScZr alloy / H. Chen, Z. Chen, G. Jib, S. Zhong, H. Wang, A. Borbely, Y. Ke, Y. Brechet // *International Journal of Plasticity*. – 2021. – V. 139. – P. 102971.

113. Fan, H. Origin of double-peak precipitation hardening in metallic alloys / H. Fan, A.H.W. Ngan, K. Gan, J.A. El-Awady // *International Journal of Plasticity*. – 2018. – V. 111. – P. 152–167.

114. Nabarro, F.R.N. Mathematical theory of stationary dislocations / F.R.N. Nabarro // *Advances in Physics*. – 1952. – V. 1. – Iss. 3. – P. 269–394.

115. Plimpton, S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics / S. Plimpton // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – V. 117. – Iss. 1. – P. 1–19.

116. Hirel, P. AtomsK: a tool for manipulating and converting atomic data files / P. Hirel // *Computer Physics Communications*. – 2015. – V. 197. – P. 212–219.

117. Stukowski, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool / A. Stukowski // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2010. – V. 18. – P. 015012.

118. Stukowski, A., Bulatov, V.V., Arsenlis, A., Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces / A. Stukowski, V.V. Bulatov, A. Arsenlis // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2012. – V. 20. – P. 085007

119. Золоторевский, В.С. Механические свойства металлов: учебник для вузов. 2-е изд. / В.С. Золоторевский. – М.:Металлургия, 1983. – 352 с.

120. Lu, K. Strengthening Materials by Engineering Coherent Internal Boundaries at the Nanoscale / K. Lu, L. Lu, S. Suresh // *Science*. – 2009. – V. 324. – Iss. 5925. – P. 349–352.

121. Новиков, И.И. Дефекты кристаллического строения металлов / И.И. Новиков. – М.: Металлургия, 1975. – 208 с.

122. Merkle, K.L. Atomic structure of grain boundaries / K.L. Merkle // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 1994. – V. 55. – Iss. 10. – P. 991–1005.

123. Zhou, Y. Hot deformation induced microstructural evolution in local-heterogeneous wire + arc additive manufactured 2219 Al alloy / Y. Zhou, X. Lin, N. Kang, Z. Wang, H. Tan, W. Huang // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2021. – V. 865. – P. 158949.

124. Zha, M. Stabilizing a severely deformed Al–7Mg alloy with a multimodal grain structure via Mg solute segregation / M. Zha, H.-M. Zhang, X.-T. Meng, H.-L. Jia, S.-B. Jin, G. Sha, H.-Y. Wang, Y.-J. Li, H.J. Roven // *Journal of Materials Science & Technology*. – 2021. – V. 89. – P. 141–149.

125. Rodak, K. Superplastic Deformation of Al–Cu Alloys after Grain Refinement by Extrusion Combined with Reversible Torsion / K. Rodak, D. Kuc, T. Mikuszewski // *Materials*. – 2020. – V. 13. – P. 5803.

126. Zhou, C. Improving creep age formability of an Al-Cu-Li alloy by electropulsing / C. Zhou, L. Zhan, H. Li // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2021. – V. 870. – P. 159482.

127. Pasang, T. Low-energy intergranular fracture in Al-Li alloys / T. Pasang, N. Symonds, S. Moutsos, R.J.H. Wanhill, S.P. Lynch // *Engineering Failure Analysis*. – 2012. – V. 22. – P. 166–178.

128. Shan, Z. Effect of three-stage homogenization on recrystallization and fatigue crack growth of 7020 aluminum alloy / Z. Shan, S. Liu, L. Ye, X. Liu, Y.

Dong, Y. Li, J. Tang, Y. Deng, X. Zhang // *Journal of Materials Research and Technology*. – 2020. – V. 9. – Iss. 6. – P. 13216–13229.

129. Bian, T.J. Through-thickness heterogeneity and in-plane anisotropy in creep aging of 7050 Al alloy / T.J. Bian, H. Li, J.C. Yang, C. Lei, C.H.Wu, L.W. Zhang, G.Y. Chen // *Materials & Design*. – 2020. – V. 196. – P. 109190.

130. Xiao, X. Effect of the Lode parameter in predicting shear cracking of 2024-T351 aluminum alloy Taylor rods / X. Xiao, Z. Mu, H. Pan, Y. Lou // *International Journal of Impact Engineering*. – 2018. – V. 120. – P. 185–201.

131. de Vaucorbeil, A. A new total-Lagrangian smooth particle hydrodynamics approximation for the simulation of damage and fracture of ductile materials / A. de Vaucorbeil, C.R. Hutchinson // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. – 2020. – V. 121. – P. 2227–2245.

132. de Vaucorbeil, A. Total-Lagrangian Material Point Method for solid mechanics problems involving large deformations / A. de Vaucorbeil, V.P. Nguyen, C.R. Hutchinson // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2020. – V. 360. – P. 112783.

133. Nassiri, A. Depiction of interfacial morphology in impact welded Ti/Cu bimetallic systems using smoothed particle hydrodynamics / A. Nassiri, A. Vivek, T. Abke, Be. Liu, T. Lee, G. Daehn // *Applied Physics Letters*. – 2017. – V. 110. – P. 231601.

134. *Generalized Continua And Dislocation Theory* / edited by C. Sansour, S. Skatulla. – Springer-Verlag Wien, 2012. – 317 p.

135. Chen, J. Shock Hugoniot and Mie-Grüneisen EOS of TiAl alloy: A molecular dynamics approach / J. Chen, W. Chen, S. Chen, G. Zhou, T. Zhang // *Computational Materials Science*. – 2020. – V. 174. – P. 109495.

136. Nosé, S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods / S. Nosé // *The Journal of Chemical Physics*. – 1984. – V. 81. – P. 511.

137. Hoover, W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions / W.G. Hoover // *Physical Review A*. – 1985. – V. 31. – P. 1695.
138. Berendsen, H.J.C. Molecular dynamics with coupling to an external bath / H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. DiNola, J.R. Haak // *The Journal of Chemical Physics*. – 1984. – V. 81. – P. 3684.
139. Daw, M.S. The embedded-atom method: a review of theory and application / M.S. Daw, S.M. Foiles, M.I. Baskes // *Materials Science Reports*. – 1993. – V. 9. – Iss. 7–8. – P. 251–310.
140. Kosevich, A.M. Dynamical theory of dislocations / A.M. Kosevich // *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*. – 1965. – V. 7. – P. 837–854.
141. Krasnikov, V.S. Dislocation based high-rate plasticity model and its application to plate-impact and ultra short electron irradiation simulations / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer, A.P. Yalovets // *International Journal of Plasticity*. – 2011. – V. 27. – Iss. 8. – P. 1294–1308.
142. Mayer, A.E. Molecular dynamics investigation of dislocation slip in pure metals and alloys. ICTAEM 2019 / A.E. Mayer, V.S. Krasnikov // In: *Proceedings of the Second International Conference on Theoretical, Applied and Experimental Mechanics*. – 2019. – V. 8. – P. 59–64.
143. Suzuki, T. *Dislocation Dynamics and Plasticity* / T. Suzuki, S. Takeuchi, H. Yoshinaga. – Springer, Berlin, Heidelberg. 1991. – 228 p.
144. Mishin, Y. Structural stability and lattice defects in copper: ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations / Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, J.D. Kress // *Physical Review B*. – 2001. – V. 63. – P. 224106.
145. Mishin, Y. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations / Y. Mishin, D. Farkas, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos // *Physical Review B*. – 1999. – V. 59. – P. 3393.

146. Mishin, Y. Phase stability in the Fe–Ni system: investigation by first-principles calculations and atomistic simulations / Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos // *Acta Materialia*. – 2005. – V. 53. – Iss. 15. – P. 4029–4041.
147. Hasson, G. Theoretical and experimental determinations of grain boundary structures and energies: Correlation with various experimental results / G. Hasson, J.-Y. Boos, I. Herbeuval, M. Biscondi, C. Goux // *Surface Science*. – 1972. – V. 31. – P. 115–137.
148. Sutton, A.P. On geometric criteria for low interfacial energy / A.P. Sutton, R.W. Balluffi // *Acta Metallurgica* – 1987. – V. 35. – Iss. 9. – P. 2177–2201.
149. Thompson, A.P. General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions / A.P. Thompson, S.J. Plimpton, W. Mattson // *The Journal of Chemical Physics*. – 2009. – V. 131. – P. 154107.
150. Apostol, F. Interatomic potential for the Al-Cu system / F. Apostol, Y. Mishin // *Physical Review B*. – 83. – 054116
151. Marchand, D. Machine learning for metallurgy I. A neural-network potential for Al-Cu / D. Marchand, A. Jain, A. Glensk, W.A. Curtin // *Physical Review Materials*. – 2020. – V. 4. – P. 103601
152. Senoo, M. Elastic Constants of Al-Cu Solid-Solution Alloys and Their Variations by Aging Treatments / M. Senoo, T. Hayashi // *JSME international journal*. – 1988. – V. 31. – Iss. 4. – P. 664–670.
153. Kanel, G.I. Unusual plasticity and strength of metals at ultra-short load durations / G.I. Kanel, E.B. Zaretsky, S.V. Razorenov, S.I. Ashitkov, V.E. Fortov // *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*. – 2017. – V. 60. – P. 490–508.
154. Zuanetti, B. Measurement of elastic precursor decay in pre-heated aluminum films under ultra-fast laser generated shocks / B. Zuanetti, S.D.

McGrane, C.A. Bolme, V. Prakash, // Journal of Applied Physics. – 2018. – V. 123. – Iss. 19. –P. 195104.

155. Ландау Л. Д. Теоретическая физика, т. 7, Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М Лифшиц // М.: Наука, 1987. – 248 с.