

07,01,10

Атомистическое моделирование движения дислокаций в металлах в условиях фононного трения

© А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин

Всероссийский научно-исследовательский институт автоматизации им. Н.Л. Духова,
Москва, Россия
Объединенный институт высоких температур РАН,
Москва, Россия
Московский физико-технический институт (Государственный университет),
Долгопрудный, Московская обл., Россия
E-mail: aleyanilkin@gmail.com

(Поступила в Редакцию 23 октября 2012 г.)

На основе метода молекулярной динамики исследована подвижность дислокаций при надбарьерном движении в различных металлах (Al, Cu, Fe, Mo). Рассчитаны коэффициенты фононного трения в зависимости от давления и температуры. Результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными и теоретическими оценками. Для ГЦК-металлов основным механизмом торможения является рассеяние фононов, для ОЦК-металлов при комнатных температурах становится существенным вклад радиационного трения. Получено соответствие зависимости коэффициента фононного трения и периода решетки от температуры. Рассчитаны зависимости коэффициента трения от давления. Для Fe в отличие от других металлов наблюдается резкий рост трения с увеличением давления при низких температурах, что связано с α - ϵ -фазовым переходом.

Расчеты проведены на вычислительных кластерах ФГУП ВНИИА, МФТИ, МСЦ РАН. Работа выполнена при финансовой поддержке по грантам РФФИ 09-08-12161-офи-м.

1. Введение

Основными механизмами пластической деформации являются зарождение, размножение и движение дислокаций, элементарных переносчиков сдвиговой деформации [1,2].

При малых скоростях движения дислокации преодолевают препятствия в результате совместного действия приложенного напряжения и тепловых флуктуаций. Вследствие этого увеличение температуры сопровождается понижением предела текучести материалов. Для деформирования с высокой скоростью необходимо приложить более высокие напряжения. При скорости деформирования больше некоторой пороговой действующие напряжения оказываются достаточными для обеспечения динамического преодоления препятствий (таких как барьеры Пайерлса), без дополнительного вклада тепловых флуктуаций. При этом доминирующим механизмом торможения дислокаций становится перекачка энергии дислокации в колебания кристаллической решетки или, в зависимости от температуры, в электронную подсистему. В зависимости скорости дислокации от прикладываемых сдвиговых напряжений выделяются два режима: первый термофлуктуационный характеризуется резким увеличением скорости на много порядков при небольшом росте напряжений в пределах одного порядка, при втором режиме наблюдается линейная зависимость. В отличие от области термофлуктуационной подвижности, скорость дислокаций в динамической области

падает с температурой в соответствии с увеличением плотности газа элементарных возбуждений (рис. 1, *a*).

Динамическое торможение проявляется не только для быстрых дислокаций, но и для медленных, определяя скорость затухания колебательного движения дислокационных сегментов между барьерами и даже кинетику термофлуктуационного преодоления дислокациями потенциальных барьеров. О величине первого эффекта можно судить по амплитудно-независимому внутреннему трению. На этом основаны экспериментальные методы определения коэффициента фононного трения (например, [3,4]).

Наиболее надежным методом исследования динамического торможения дислокаций является измерение подвижности индивидуальных дислокаций [5]. В кристалл с малой плотностью дислокаций вводят небольшое число новых дислокаций и наблюдают пробег дислокаций под действием импульса напряжений. Точность измерений лимитируется значительным разбросом длин пробега дислокаций, вызванным наличием в кристалле внутренних напряжений и различных дефектов.

Динамическое торможение дислокаций проявляется в экспериментах по высокоскоростному деформированию кристаллов ($\dot{\epsilon} > 10^3 - 10^4 \text{ s}^{-1}$). Увеличение взаимодействия движущейся дислокации с колебаниями решетки с ростом температуры приводят к аномальной температурной зависимости динамического предела текучести в экспериментах с монокристаллами [6]. На рис. 1, *b* схематически изображена зависимость динамического предела текучести от скорости деформирования для

двух температур. При переходе к высоким скоростям деформирования наклон зависимости сильно возрастает, а влияние температуры становится обратным. Такое поведение подобно зависимости скорости дислокаций от приложенных напряжений (рис. 1, *a*), и, видимо, скорость пластической деформации определяется движением дислокаций.

В большинстве случаев определяющую роль в динамическом торможении играют диссипативные процессы в фоновой подсистеме кристалла. Вклад других типов элементарных возбуждений (электронов, экситонов) проявляется лишь в специальных условиях. Например, в металлах при низких температурах, когда фоновый газ выморожен, существенным оказывается взаимодействие движущейся дислокации с электронами проводимости. Обзор работ по исследованию влияния электронов на торможение дислокаций представлен в работе [7].

Изучение механизмов, лимитирующих подвижность дислокаций в динамическом режиме началось более полувека назад в ряде теоретических работ [8–10]. Отметим лишь наиболее важные для данного рассмотрения процессы взаимодействия дислокаций с фононами.

Во-первых, имеет место рассеяние фононов на дислокации. Действительно, в системе координат, связанной с движущейся дислокацией, поток фононов, налетающих на дислокацию, асимметричен. Рассеиваясь, фононы передают ей импульс, в результате дислокация испытывает давление фоновый ветра. Выделяют два механизма рассеяния, обусловленных: а) нелинейными упругими свойствами (ангармонизмом) кристалла вблизи дислокации; б) переизлучением упругих волн в результате вынужденных колебаний дислокации (флаттер-эффект) в переменном поле напряжений, связанным с тепловыми фононами.

Во-вторых, движение дислокации по некоторому потенциальному рельефу приводит к излучению ей упругих волн, т.е. радиационному трению. Движение в периодическом потенциале, связанном с дискретностью кристалла (так называемый рельеф Пайерлса), приводит к периодическим изменениям структуры ядра и колебаниям скорости дислокации. Соответствующие изменения поля деформаций решетки и энергии дислокации порождает излучение упругих волн.

В-третьих, при движении дислокации может происходить термоупругая диссипация энергии из-за выравнивания температуры потоками фононов между нагретыми и охлажденными участками кристалла, подвергающихся быстрому сжатию и растяжению.

Коэффициент динамического торможения дислокации B определяется как коэффициент пропорциональности между скоростью v и силой вязкого торможения F дислокации (на единицу длины): $B = F/v$. В работе [8] был вычислен коэффициент фоновый торможения при рассеянии упругих волн дислокацией. Взяв разницу импульсов, передаваемых дислокации упругими волнами, распространяющимися в направлении движения дислокации и в противоположную сторону, и усреднив по

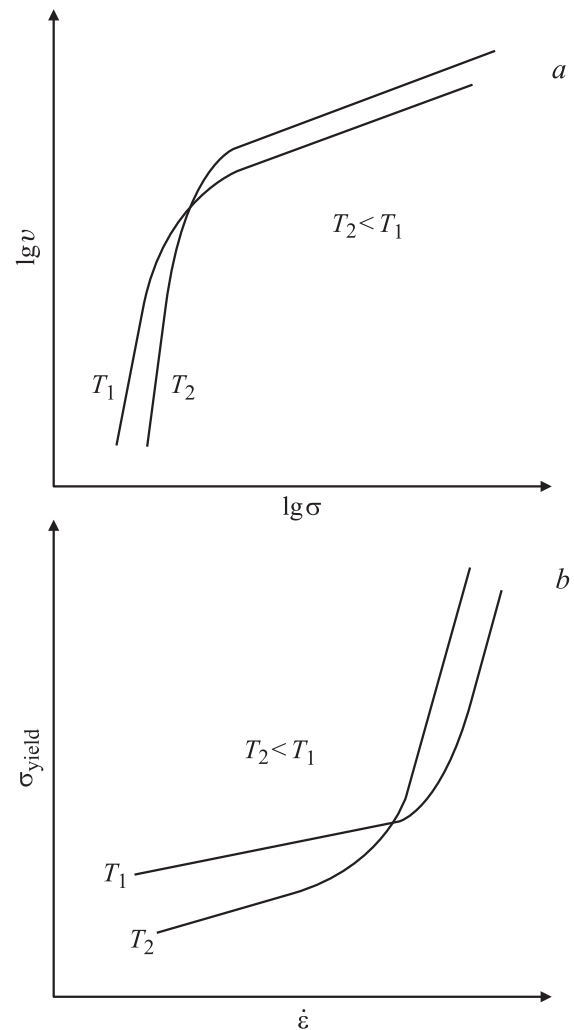


Рис. 1. *a* — зависимость скорости движения дислокации от приложенных сдвиговых напряжений для двух температур. *b* — зависимость динамического предела текучести от скорости деформирования для двух температур.

различным направлениям и частотам фононов, было получено следующее выражение:

$$B_p = \frac{q}{10c_t} \epsilon_{ph}^-, \quad (1)$$

где q — транспортный поперечник рассеяния фононов на дислокации, c_t — поперечная скорость звука, ϵ_{ph}^- — средняя плотность энергии фононов. В работе [8] в качестве величины поперечника рассеяния q берется величина порядка вектора Бюргерса b .

Основными проблемами, с которой сталкивается теория, являются определение поперечника рассеяния фононов и учет отклонения реального спектра фононов от Дебаевского. В работе [11] сделана оценка поперечника рассеяния фононов, обусловленного нелинейным механизмом $\pi\gamma^2 b^2/\lambda$, где γ — коэффициент Грюнайзена, λ — длина волны фонона. При этом деформация вокруг дислокации рассматривается в приближении

континуальной теории, и не делается различия между винтовыми и краевыми дислокациями, деформациями сдвига и растяжения, равно как и между поперечными и продольными фононами.

Тогда выражение (1) для коэффициента фоновонного трения принимает вид

$$B_p = 8\pi^2 \gamma^2 \frac{\hbar}{b^3} \left(\frac{k_D b}{2\pi} \right)^5 \frac{T}{\Theta_D} D_3 \left(\frac{\Theta_D}{T} \right), \quad (2)$$

где k_D — дебаевская граница в спектре фононов, Θ_D — температура Дебая. Функция $D_3(x_D)$ в формуле имеет вид

$$3/x_D^3 \int_0^{x_D} x^3 / (e^x - 1) dx.$$

В исследуемом интервале температур ($x_D \sim 0.7-3$) функция $D_3(x_D)$ принимает значения, близкие к единице, поэтому для дальнейших теоретических оценок будем принимать $D_3(x_D)$ равной единице.

В обзорной работе [10] приводится следующая формула для расчета коэффициента фоновонного трения для винтовой дислокации в области высоких температур, использующая в качестве меры ангармонизма модули третьего порядка и учитывающая конечность размера ядра дислокации

$$B_p = \left(\frac{M}{G} \right)^2 \frac{\hbar}{b^3} \left(\frac{k_D b}{2\pi} \right)^5 \frac{T}{\Theta_D}, \quad (3)$$

где M — характерное значение модуля третьего порядка, G — модуль сдвига. Если учесть конечность деформаций в ядре дислокации, то возникает множитель $1/(4k_D r_0)$, где r_0 — характерный размер ядра дислокации. Отношение $|M/G|^2$ для винтовой дислокации $4 + (n/G - 6)^2$, где n — модуль Мурнагана [12].

Оценки коэффициента трения по формулам (2) и (3) дают значения $10^{-6} - 10^{-5}$ Па · с при комнатных температурах.

Хотя в теоретическом описании торможения дислокаций достигнуты большие успехи, получены зависимости коэффициента фоновонного трения от температуры для различных механизмов, теория может дать только приближенные значения, и для уточнения результатов необходимо знать реальный фоновонный спектр и его изменение с температурой и давлением. Поэтому является целесообразным проведение МД-расчетов подвижности дислокаций напрямую. В качестве примеров таких работ можно отметить [13–16]. МД-расчеты позволяют определить зависимость скорости движения дислокаций от величины сдвиговых напряжений и соответственно величину коэффициента фоновонного трения. Результаты таких расчетов успешно используются с многомасштабных подходах при моделировании высокоскоростной деформации [16–18].

Целью данной работы является исследование подвижности одиночных дислокаций в условиях надбарьерного

движения. Для этого методом МД определены зависимости коэффициента фоновонного трения от давления и температуры для нескольких ОЦК (Fe, Mo)- и ГЦК-металлов (Al, Cu) с использованием различных потенциалов взаимодействия. На основе полученных данных проводится анализ применимости теоретических формул (2), (3) для расчета фоновонного трения в зависимости от температуры и давления, а также вклада факторов, связанных с особенностями строения и поведения дислокаций в том или ином материале, и не входящих в явном виде в теоретические выражения. Отдельный акцент сделан на воспроизведении межчастичными потенциалами макроскопических свойств, важных для динамики дислокацией, которые можно было бы сравнительно просто проверить при верификации потенциала, без прямого моделирования движения дислокаций.

2. Молекулярно-динамическая модель

К настоящему времени предложено несколько вариантов МД-моделей (с разными граничными условиями), позволяющих изучать подвижность единичных дислокаций [14]. В наших расчетах за основу был взят вариант модели, предложенный в работе [13], где периодические граничные условия применяют не только вдоль оси дислокации, но также и вдоль направления вектора Бюргера дислокации b . Эта модель была опробована для исследования движения дислокации в монокристаллическом алюминии [15,16]. В этом случае систему можно представить как массив дислокаций, периодически повторяющихся в пространстве.

Модель для исследования подвижности дислокаций подробно изложена в работах [15,16]. Для ГЦК-металлов рассмотрена система скольжения $[1\bar{1}0](111)$. Вектор Бюргера полной краевой дислокации, обеспечивающей такое скольжение, будет $b = a/2[1\bar{1}0]$. Характерный размер расчетной ячейки вдоль вектора Бюргера составлял 500 Å, вдоль дислокационной линии 30 Å. Общее число атомов $1.4 \cdot 10^6$.

Для исследования движения краевой дислокации в ОЦК-металлах использовались другие кристаллографические направления, соответствующие плоскостям скольжения и векторам Бюргера в ОЦК-металла [2] $b = a/2[111]$ и плоскость скольжения (110). Характерный размер расчетной ячейки вдоль вектора Бюргера составлял 600 Å, вдоль дислокационной линии 20 Å. Общее число атомов $7 \cdot 10^5$. Пример модели с диполем краевых дислокации рассмотрен в работе [19].

При МД-моделировании использовались потенциалы межчастичного взаимодействия, разработанные в формате метода погруженного атома (embedded atom method — EAM). Для описания алюминия использовалось несколько потенциалов [20–23]. Основные результаты были получены с [20]. Для меди использовался потенциал [24]. Также для исследования дислокации в молибдене использовалось три потенциала [25–27].

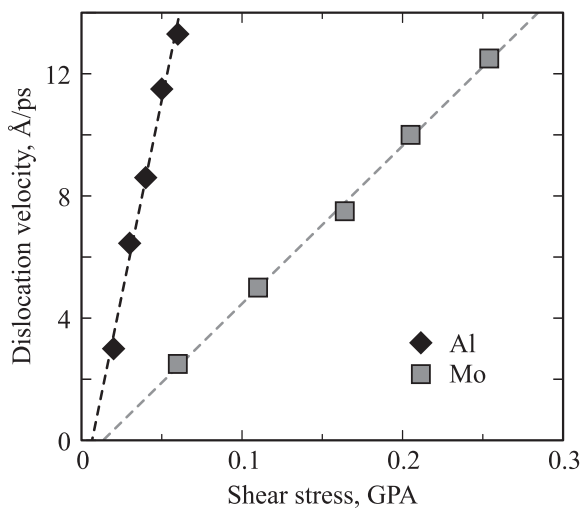


Рис. 2. Рассчитанная зависимость скорости движения дислокации от приложенных сдвиговых напряжений для алюминия и молибдена при $T = 300$ K.

Межатомное взаимодействие в железе описывалось с помощью [28].

Для создания сдвигового напряжения σ , действующего в рассматриваемой плоскости скольжения дислокации, производится деформация расчетной ячейки. В выбранной геометрии МД-модели используется деформация чистого сдвига. Под действием силы, возникающей в плоскости скольжения, атомы, находящиеся вблизи ядра дислокации, начинают перестраиваться. В результате положение ядра (или ядер) дислокации изменяется со временем. Непосредственным результатом такого МД-расчета являются координата и скорость ядра дислокации в зависимости от времени. В стационарном режиме динамического торможения, когда установившаяся скорость дислокации v постоянна во времени, она связана с действующим сдвиговым напряжением σ

$$\sigma b = B(v)v, \quad (4)$$

где b — величина вектора Бюргера дислокации. По зависимости σ от v можно определить коэффициент фоновго трения B . Вообще говоря, он может меняться в зависимости от v .

Во всем исследованном диапазоне увеличение температуры приводит к уменьшению скорости дислокации, таким образом, движение дислокаций не требует термоактивации: имеет место динамический режим с фоновным трением. Движение лимитируется перекачкой энергии от дислокации к элементарным возбуждениям в кристалле. Выделяются два режима (особенно при низких температурах): линейный в области низких значений напряжения и режим асимптотического приближения скорости дислокации к поперечной скорости звука. Обычно при анализе зависимости v от σ ограничиваются линейным участком. Пример такой зависимости для краевой дислокации в алюминии и молибдене показан на

рис. 2. При рассмотрении ударно-волнового нагружения на фронте ударной волны могут возникать большие девиаторные напряжения, и в этом случае необходима аппроксимация всей зависимости с учетом асимптотической ветви. В настоящей работе будет рассматриваться только линейный участок, описываемый постоянным значением коэффициента торможения B .

3. Результаты

3.1. Коэффициент фоновго трения железа, молибдена, алюминия, меди в зависимости от температуры. На рис. 3 показана зависимость коэффициента динамического торможения для четырех металлов. Для ГЦК-металлов (медь, алюминий) с понижением температуры коэффициент B стремится к нулю, что связано с вымораживанием фононов.

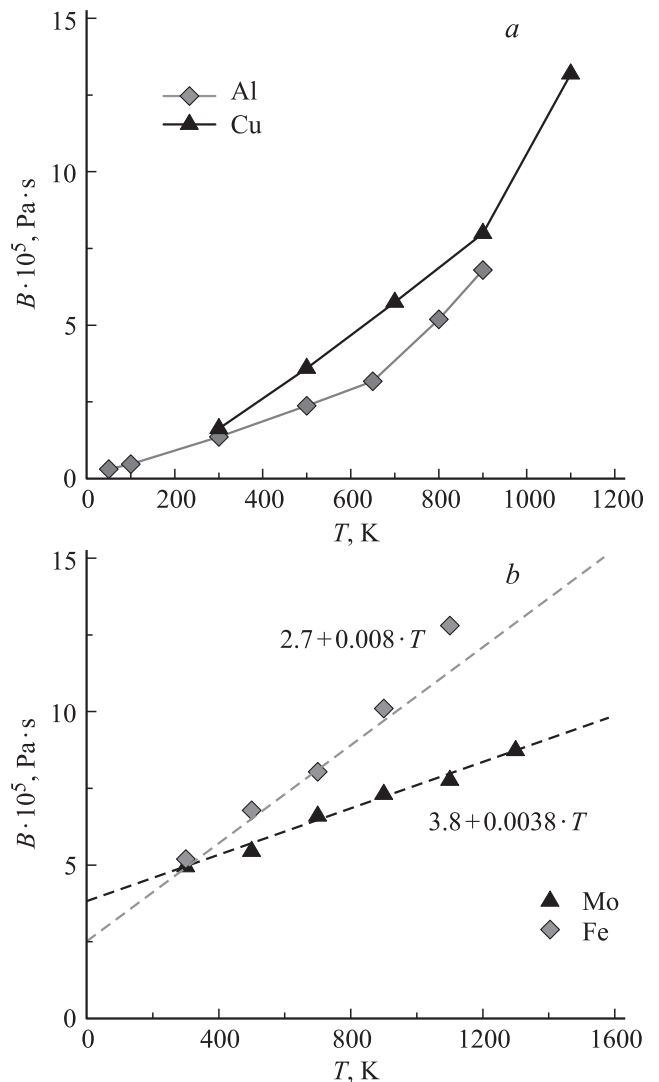


Рис. 3. Зависимость коэффициента фоновго трения для Fe, Mo (a) и Al, Cu (b) от температуры. Для Mo показаны результаты с потенциалом [27], для Al — [20].

Для ОЦК-металлов экстраполяция зависимости $B(T)$ в область низких температур дает ненулевое значение при $T = 0$ К. Вероятно, это связано с особым механизмом диссипации — радиационным трением, который сильнее выражен для ОЦК-металлов из-за более высокого (по сравнению с ГЦК-кристаллами) рельефа Пайерлса. Благодаря дискретности решетки при перемещении дислокации в кристалле ее атомная конфигурация и упругая энергия испытывают периодические изменения. Это приводит к излучению движущимися дислокациями упругих волн. Этот механизм диссипации сохраняется и при самых низких температурах.

С приближением к температуре плавления (алюминий — $T_m = 933$ К, медь — $T_m = 1366$ К) наблюдается резкий нелинейный рост коэффициента трения. Для ОЦК-металлов нелинейный рост также наблюдается, но значительно меньший по величине, поскольку температуры плавления велики (железо — $T_m = 1812$ К, молибден — $T_m = 2890$ К). Температурные зависимости коэффициента трения для железа и молибдена практически совпадают при нормировке температуры на температуру плавления.

Абсолютное значение коэффициента торможения дислокации в алюминии при $T = 300$ К, определенное из обработки МД-расчетов, составило приблизительно $1.4 \cdot 10^{-5}$ Па·с, что близко к экспериментальным значениям. По оценкам различных экспериментов оно варьируется от $0.5 \cdot 10^{-5}$ Па·с (затухание ультразвука, 1970 [3]) и $2.6 \cdot 10^{-5}$ Па·с (подвижность дислокаций, 1969 [5]) до $17 \cdot 10^{-5}$ Па·с (затухание ультразвука, 1966, см. обзор [10]). Значение коэффициента торможения из различных экспериментов систематически отличаются друг от друга, что может объясняться различием используемых методик и физической неэквивалентностью образцов.

Для меди также наблюдается хорошее согласие с экспериментом. Из МД-расчетов значения коэффициента торможения при $T = 300$ К составило $3 \cdot 10^{-5}$ Па·с, что лежит в рамках экспериментального значения, определенного различными методами (см. обзор [10]). На основе измерения затухания ультразвука получены значения 1.0 – $8.5 \cdot 10^{-5}$ Па·с. Эксперименты по подвижности отдельных дислокаций дают величины 1.7 – $7 \cdot 10^{-5}$ Па·с.

Полученные результаты для железа близки к результатам МД-моделирования других авторов, использующих модель диполя краевых дислокаций [14]. На основе зависимостей скорости дислокаций от приложенных сдвиговых напряжений из работы [14] можно оценить коэффициент торможения при $T = 300$ К как $2.5 \cdot 10^{-5}$ Па·с.

Сопоставим полученные результаты для ОЦК-металлов с теоретическими формулами (2) и (3), поскольку для ГЦК-металлов сопоставление менее однозначно из-за диссоциации на две частичные. Для этого аппроксимируем результаты расчетов в виде линейной функции от температуры, и выделим поперечник взаимодействия из коэффициента фононного трения по формуле (1).

Коэффициент Грюнаизена γ , вектор Бюргерса b , температура Дебая Θ_D , отношение модуля сдвига и модуля третьего порядка $|M/G|$, значение поперечников рассеяния, полученные из МД расчетов q_{MD} и теоретических формул q_{Zim} и q_{Alsh}

Metal	γ	$b, \text{ \AA}$	$\Theta_D, \text{ K}$	$ M/G $	$q_{MD}, \text{ \AA}$	$q_{Zim}, \text{ \AA}$	$q_{Alsh}, \text{ \AA}$
Mo	1.5	2.7	450	~ 10	~ 2	~ 12	~ 0.4
Fe	1.7	2.5	460	~ 10	~ 3.5	~ 15	~ 0.4

Для расчета энергии фононов и скорости звука будем использовать модель Дебая и экспериментальные значения температуры Дебая Θ_D . Для теоретической оценки с помощью формул (2) и (3) рассчитаем поперечник рассеяния q , который представляет собой коэффициенты $q_{Zim} = \gamma^2 b^2 k_D / 2$ и $q_{Alsh} = |M/G|^2 b^2 / 64 \pi^2 r_0$. Типичное для металлов значение отношения $|M/G|$ примерно равно 10 [10,11]. В качестве значения эффективного радиуса ядра r_0 возьмем значение вектора Бюргерса b . В таблице приведены полученные из МД и рассчитанные значения.

Таким образом, оценка по формуле (2) значительно превышает величину фононного трения. В подходе работы [10] было бы получено также довольно большое значение, но ситуацию улучшает учет конечности деформаций в ядре дислокации в формуле (3). Хотя оценка радиуса ядра дислокации величиной вектора Бюргерса занижает значения и, возможно, стоит использовать меньшие значения. Полученное значение по порядку величины соответствует результатам моделирования. Более точную теоретическую оценку получить сложно, поскольку неизвестен эффективный размер ядра дислокации, а в качестве величины M используется характерное значение модуля третьего порядка.

3.2. Связь коэффициента трения с температурным расширением. Температурная зависимость коэффициента трения дислокаций практически линейная для всех металлов в области умеренных температур. Такой ход кривой $B(T)$ описывается в рамках существующих теорий фононного трения [10]. Но изменение коэффициента трения с температурой может оказаться значительно сложнее: например, в расчетах для Мо с использованием трех потенциалов межатомного взаимодействия [25–27] (см. рис. 4). Для двух потенциалов наблюдается возрастающая зависимость от температуры, близкая к линейной. Для третьего потенциала при низкой температуре зависимость оказывается убывающей.

Сравнение результатов для различных потенциалов для одного и того же вещества интересно, поскольку такие величины как плотность, модули упругости и соответственно температуры Дебая описываются с помощью этих потенциалов довольно хорошо, и значения этих величин для разных потенциалов близки. Более тонкие эффекты, связанные с ангармонизмом колебаний решетки, описываются значительно хуже, что приводит к различным величинам коэффициента теплового рас-

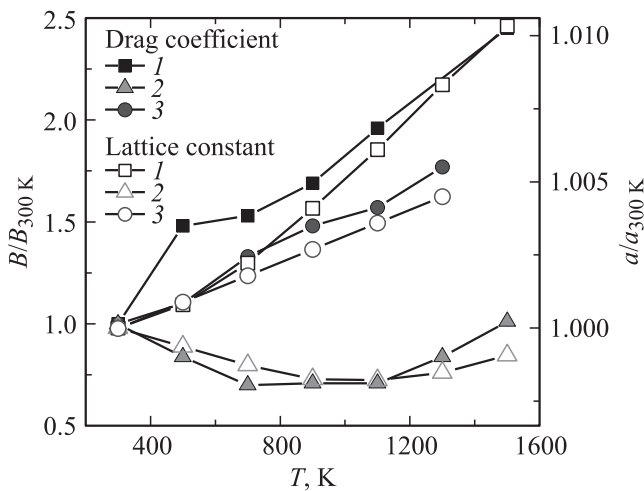


Рис. 4. Сопоставление приведенных зависимостей коэффициента трения и периода решетки Мо от температуры для трех потенциалов взаимодействия: 1 — [25], 2 — [26], 3 — [27].

ширения, которые могут различаться даже по знаку. Аналогично различное описание ангармонизма приводит к разной величине коэффициента фоновонного трения. Как видно из рис. 4, есть хорошее соответствие между температурными зависимостями постоянной решетки кристалла при тепловом расширении и фоновонного трения.

Коэффициент теплового расширения α выражается через теплоемкость c_v и коэффициент Грюнрайзена γ следующим образом:

$$\alpha = \frac{\gamma c_v}{3B}, \quad (5)$$

где B — модуль объемного сжатия, а c_v — теплоемкость кристалла. Выражение для периода решетки, полученное интегрированием (по температуре) величин в формуле (5), при постоянном значении коэффициента Грюнрайзена близко к формуле (1) с точностью до влияния ангармонизма. В зависимость объема от температуры коэффициент Грюнрайзена входит в первой степени. Тогда как в конечные формулы для коэффициента фоновонного трения (2) и (3) величины, характеризующие ангармонизм, входят в степени два. В случае отрицательной величины коэффициента Грюнрайзена коэффициент теплового расширения также отрицателен. Такой случай реализуется для молибдена с потенциалом [26]. Это приводит к минимуму на зависимости коэффициента торможения от температуры. Такое поведение можно объяснить, предположив, что коэффициент трения является суммой коэффициентов трения, связанных с радиационным трением и рассеянием фононов на дислокации. Первый не зависит от температуры, а второй зависит и пропорционален квадрату коэффициента Грюнрайзена в соответствии с формулой (2). В результате при температуре, когда достигается минимум периода решетки и коэффициент Грюнрайзена обращается в нуль, достигается и минимум коэффициента трения.

3.3. Зависимость коэффициента трения от давления. В условиях ударного нагружения давление может достигать нескольких мегабар и выше. В таких условиях подвижность дислокаций может существенно отличаться от подвижности при нулевом давлении. Для исследования влияния давления рассматривалась подвижность дислокаций в условиях гидростатического сжатия. Рассматривалось четыре металла и степени деформирования до 12%. На рис. 5, а представлены графики зависимости коэффициента трения в Мо и Fe от деформации для двух температур (300 К и 700 К). В Мо при комнатной температуре при увеличении давления до 40 GPa коэффициент трения падает более, чем в 2 раза. В области высоких температур вначале наблюдается резкое падение, потом коэффициент трения практически не зависит от давления или деформации. Железо при комнатной температуре

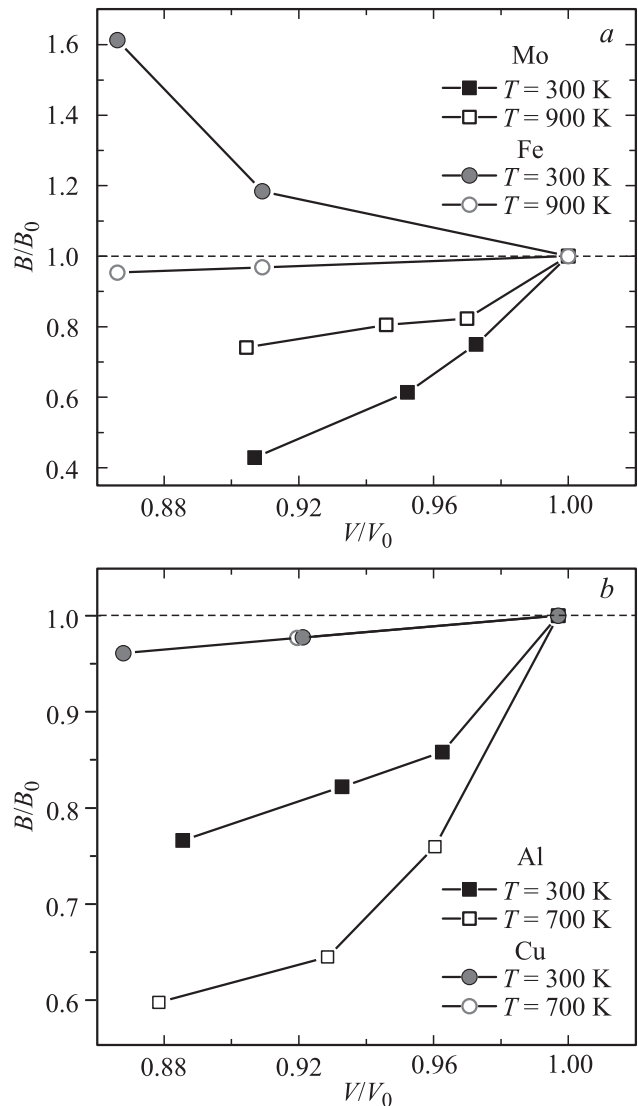


Рис. 5. Зависимость коэффициента фоновонного трения для Мо, Fe (а) и Al, Cu (b) от степени деформации. Для Мо показаны результаты с потенциалом [27], для Al — [20].

ведет себя иначе: коэффициент трения резко возрастает с увеличением давления. По-видимому, это связано с α - ϵ -переходом, который происходит при комнатной температуре при давлении 13 ГПа. В моделировании фазового перехода не наблюдалось, но, возможно, близость фазового перехода приводит к возрастанию флуктуаций зародышей новой фазы, препятствующих движению дислокаций, а следовательно, и коэффициента трения.

Для алюминия (рис. 5, *b*) зависимости противоположны — при низких температурах изменение давления не приводит к существенному уменьшению трения, при высоких температурах роль давления увеличивается. Для меди изменений коэффициента трения с давлением практически не наблюдается.

Зависимость коэффициента фоновонного трения от давления и деформации можно учесть с помощью изменения температуры Дебая с изменением объема

$$\ln \left[\Theta_D(V) / \Theta_D(V_0) \right] = \int_V^{V_0} \frac{\gamma(V)}{V} dV, \quad (6)$$

где γ — константа Грюнайзена.

Тогда зависимость от объема или давления выражается следующей формулой:

$$B_{\text{ph}}(V, T) = B_{\text{ph}}^0 \frac{q(V)}{q(V_0)} \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \frac{D_E(x_D)}{D_E(x_D^0)}, \quad (7)$$

где введено обозначение $D_E(x_D) = D_3(x_D)/x_D$, B_{ph}^0 — коэффициент фоновонного трения при стандартном давлении и температуре $T = 273$ К.

При уменьшении объема на 10% коэффициент фоновонного трения падает примерно на 10% при постоянном $q(V) = \text{const}$. В случае формулы (2) $A(V)$ пропорциональна γ^2 , поэтому основной вклад вносит изменение коэффициента Грюнайзена или модулей третьего порядка при деформировании.

3.4. Влияние расстояния между частичными дислокациями. На рис. 6 показана зависимость коэффициента фоновонного трения в Al от температуры для четырех различных потенциалов. Для трех потенциалов зависимости практически совпадают, тогда как для четвертого [23] наблюдается существенное отличие в области невысоких температур, которое исчезает с приближением к температуре плавления. В данном случае объяснить различие результатов разницей в тепловом расширении не удается: зависимости периода решетки от температуры очень близки для всех потенциалов (рис. 6).

Отметим, что для ГЦК-металлов происходит расщепление полной дислокации, энергетически менее выгодной, на две частичные краевые дислокации, отделенные друг от друга областью дефекта упаковки. Атомная конфигурация расщепленной дислокации может оказывать влияние на коэффициент фоновонного трения. Равновесное расстояние между дислокациями определяется силой взаимодействия между ними и силой поверхностного натяжения, которое стремится уменьшить площадь дефек-

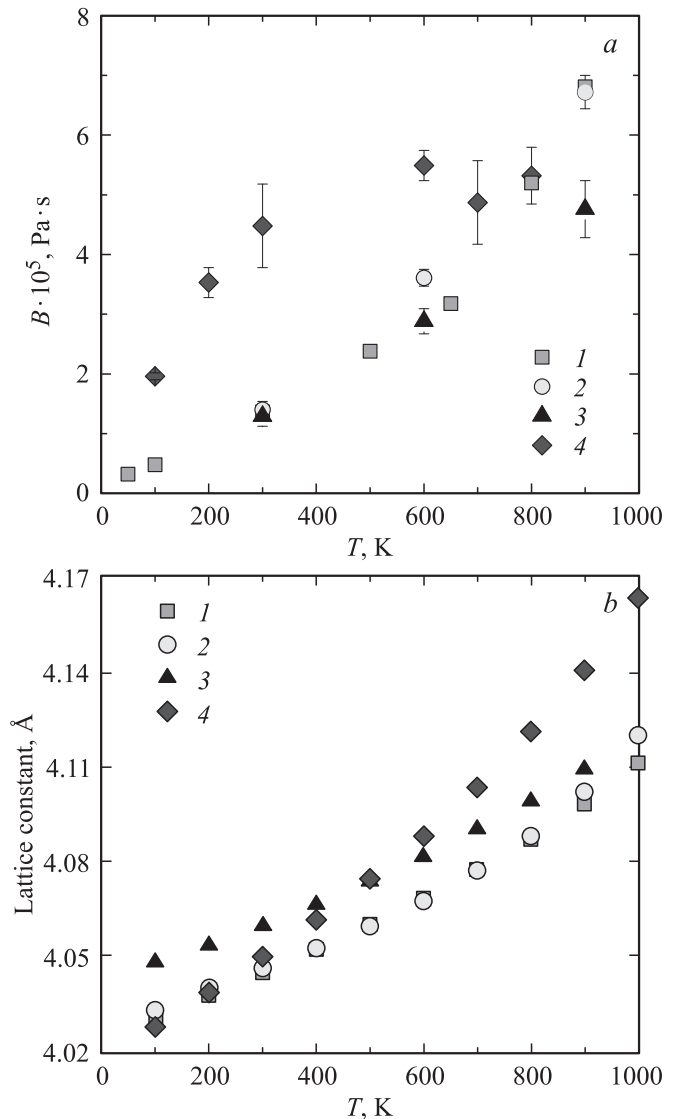


Рис. 6. Зависимость коэффициента фоновонного трения (*a*) и равновесного значения периода решетки (*b*) Al от температуры для четырех потенциалов взаимодействия: 1 — [20], 2 — [21], 3 — [22], 4 — [23].

та упаковки [2]. На рис. 7 приведена зависимость энергии единицы площади дефекта упаковки от смещения из начального состояния в направлении $\langle 211 \rangle$ в плоскости скольжения $\{111\}$. Конечное состояние соответствует структуре стабильного дефекта упаковки. Практически для всех потенциалов наблюдается хорошее согласие с квантовыми расчетами [29], несколько занижает величину энергии дефекта упаковки потенциал [20].

Расстояние между дислокациями удобнее всего определить из МД-расчета. Это можно сделать на основе метода [30] анализа общих соседей атомов, который позволяет установить к кристаллической решетке какого типа близко локальное окружение некоторого атома. Структура дефекта упаковки между частичными дислокациями соответствует гексагональной плотно упаков-

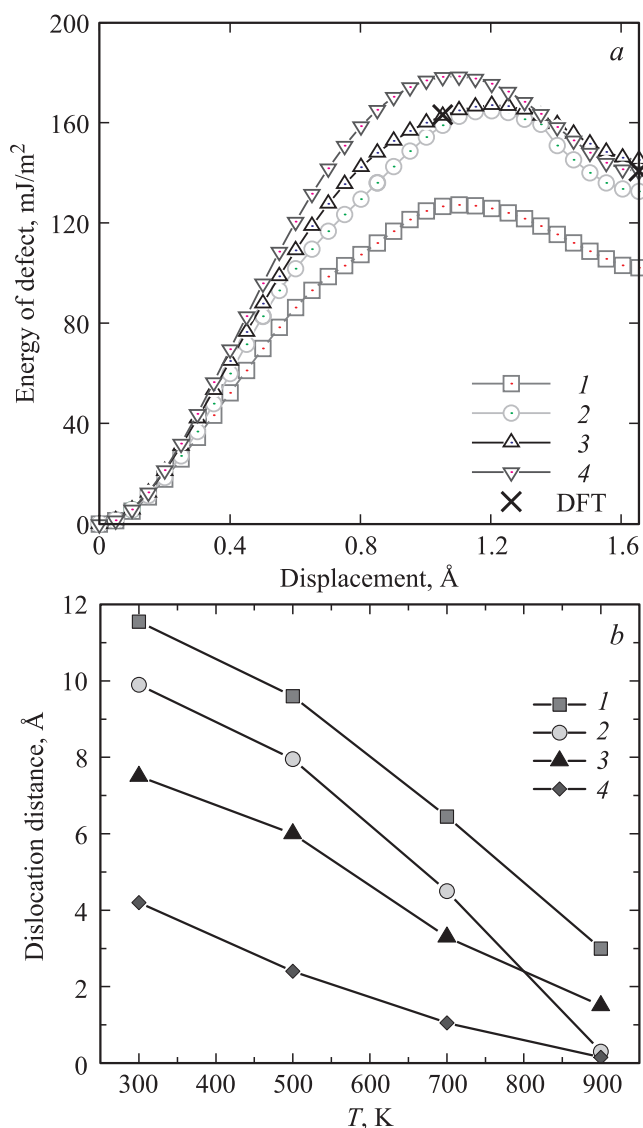


Рис. 7. *a* — зависимость энергии единицы поверхности при образовании дефекта упаковки в Al. *b* — зависимость расстояния между дислокациями от температуры. 1 — [20], 2 — [21], 3 — [22], 4 — [23].

ванной решетке, поэтому упомянутый метод позволяет выделить атомы, находящиеся в дефекте упаковки. На основе количества атомов в дефекте упаковки определяется расстояние между частичными дислокациями. На рис. 7 показаны зависимости расстояния между дислокациями от температуры. Для всех потенциалов наблюдается существенное уменьшение расстояния с увеличением температуры. Это связано с уменьшением модуля сдвига с ростом температуры, а следовательно и силы, обеспечивающей расталкивание частичных дислокаций. Для потенциала [20] наблюдается самое большое расстояние, что связано с малой величиной энергии дефекта упаковки. Для потенциала [23] энергия дефекта упаковки в максимуме (рис. 7) наибольшая, а расстояние между частичными дислокациями самое маленькое и

близко к значению вектора Бюргерса. В результате этого дислокация практически не расщепляется, что существенно меняет поля смещений атомов вокруг дислокации по сравнению с расщепленной дислокацией. Такое отличие приводит к изменению сопротивления движению дислокации: при низких температурах динамический коэффициент трения существенно больше для потенциала [23]. С повышением температуры расстояние между частичными дислокациями резко уменьшается. Структура дислокаций становится схожей для различных потенциалов, что приводит и к близким значениям коэффициента фоннного трения.

4. Заключение

В работе методом молекулярной динамики проведено исследование подвижности одиночных дислокаций в условиях надбарьерного движения. На основе полученных результатов можно сделать следующие выводы.

1. Теоретические формулы (2) и (3) для расчета коэффициента фоннного трения дают правильные по порядку величины результаты, если учитывать конечность размера ядра дислокации. В противном случае они приводят к завышению на 1–2 порядка.

2. На основе сопоставления с теоретическими формулами выделены основные требования к потенциалам взаимодействия, необходимые для описания движения дислокаций. Должны хорошо воспроизводиться: (i) — упругие модули, которые определяют скорость звука и фоннный спектр; (ii) — коэффициент Грюнайзена, модули третьего порядка или коэффициент теплового расширения, характеризующие ангармонизм и описывающие рассеяние фононов.

3. Для ОЦК-металлов в области низких температур коэффициент динамического трения дислокаций стремится к ненулевому значению, оставаясь заметной величиной, что связано с диссипацией энергии дислокации по механизму радиационного трения, который сильнее выражен для ОЦК-металлов из-за более высокого (по сравнению с ГЦК-кристаллами) рельефа Пайерлса.

4. При приближении к границе фазового перехода (плавление в Al, Cu, α - ϵ -переход в Fe) наблюдается значительный рост коэффициента трения. Это можно объяснить увеличением концентрации флуктуационных зародышей новой фазы, являющихся препятствием для движения дислокации.

5. В ГЦК-металлах существенное влияние на коэффициент трения оказывает структура расщепленной дислокации. В случае расщепления на небольшое расстояние, когда структура диполя частичных дислокаций близка к одной полной, происходит увеличение коэффициента трения. Поэтому для ГЦК-металлов существенным при построении потенциалов является расстояние между частичными дислокациями в диполе.

Список литературы

- [1] E. Orowan. *Z. Phys.* **89**, 605 (1934).
- [2] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 601 с.
- [3] A. Hikata, R.A. Johnson, C. Elbaum. *Phys. Rev. B* **2**, 4856 (1970).
- [4] А.М. Петченко, Г.А. Петченко. Вопросы атомной науки и техники **6**, 46 (2007).
- [5] J.A. Gorman, D.S. Wood, T.Jr. Vreeland. *Phys. Rev. B* **40**, 833 (1969).
- [6] Г.И. Капель, В.Е. Фортгов, С.В. Разоренов. *УФН* **177**, 809 (2007).
- [7] Т. Судзуки, Х. Ёсинага, С. Такеути. Динамика дислокаций и пластичность. Мир, М. (1989). 294 с.
- [8] G. Leibfried. *Z. Physik* **127**, 344 (1950).
- [9] A.D. Brailsford. *J. Appl. Phys.* **43**, 1380 (1972).
- [10] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. *УФН* **115**, 3 (1975).
- [11] Дж. Займан. Электроны и фононы. ИЛ, М. (1962). 213 с.
- [12] В.И. Альшиц. *УФН* **11**, 2405 (1969).
- [13] M.S. Daw, S.M. Foiles, M.I. Baskes. *Mater. Sci. Rep.* **9**, 251 (1992).
- [14] Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **11**, 427 (2003).
- [15] А.Ю. Куksин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. Докл. РАН **420**, 467 (2008).
- [16] В.С. Красников, А.Ю. Куksин, А.Е. Майер, А.В. Янилкин. *ФТТ* **7**, 1295 (2010).
- [17] V.S. Krasnikov, A.E. Mayer, A.P. Yalovets. *Int. J. Plasticity* **27**, 1294 (2011).
- [18] N.R. Barton, J.V. Bernier, R. Becker, A. Arsenlis, R. Cavallo, J. Marian, M. Rhee, H.-S. Park, B.A. Remington, R.T. Olson. *J. Appl. Phys.* **109**, 073 501 (2011).
- [19] J. Changa, W. Cai, V.V. Bulatov, S. Yip. *Mater. Sci. Eng. A* **309**, 160 (2001).
- [20] X.-Y. Liu, Xu Wei, S.M. Foiles, J.B. Adams. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1578 (1998).
- [21] X.-Y. Liu, F. Ercolessi, J.B. Adams. *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **12**, 665 (2004).
- [22] Y. Mishin, D. Farkas, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos. *Phys. Rev. B* **59**, 3393 (1999).
- [23] J.M. Winey, A. Kubota, Y.M. Gupta. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **055 001**, 1 (2009).
- [24] Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, J.D. Kress. *Phys. Rev. B* **63**, 224 106 (2001).
- [25] Finnis Sinclair. *Phil. Mag. A* **56**, 15 (1987).
- [26] P.M. Derlet, D. Nguyen-Manh, S.L. Doudarev. *Phys. Rev. B* **76**, 054 107 (2007).
- [27] S.V. Starikov, Z. Insepov, J. Rest, A.Yu. Kuksin, G.E. Norman, V.V. Stegailov, A.V. Yanilkin. *Phys. Rev. B* **84**, 104 109 (2011).
- [28] M.I. Mendeleev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sun, M. Asta. *Philosophical Magazine* **83**, 3977 (2003).
- [29] S.G. Srinivasan, X.Z. Liao, M.I. Baskes, R.J. McCabe, Y.H. Zhao, Y.T. Zhu. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 125 502 (2005).
- [30] D. Faken, H. Jonsson. *Comp. Mater. Sci.* **2**, 279 (1994).