

Пластическая деформация при высокоскоростном нагружении алюминия: многомасштабный подход

© В.С. Красников¹, А.Ю. Куксин^{2,3}, А.Е. Майер⁴, А.В. Янилкин^{2,3}

¹ Челябинский государственный университет,
Челябинск, Россия

² Объединенный институт высоких температур РАН,
Москва, Россия

³ Московский физико-технический институт (Государственный университет),
Долгопрудный, Московская обл., Россия

⁴ Южно-Уральский государственный университет,
Челябинск, Россия

E-mail: aleyanilkin@gmail.com

(Поступила в Редакцию 29 июля 2009 г.)

Для описания пластической деформации при высокоскоростном нагружении металлов предложен двухуровневый подход. На атомистическом уровне при помощи молекулярно-динамического моделирования исследуются характеристические движения дислокаций под действием сдвиговых напряжений. На континуальном уровне для описания макроскопического движения вещества применяется модель механики сплошной среды с дислокациями, использующая информацию о динамике дислокаций, полученную на атомистическом уровне. На основе предложенного подхода проведено исследование эволюции дислокационной подсистемы при ударно-волновом нагружении алюминиевой мишени. Изучено поведение динамического предела текучести с ростом температуры, результаты соответствуют экспериментальным данным.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 09-08-00521, 09-08-01116-а РФФИ–Урал № 07-08-96032, программ Президиума РАН № 11, 12.

1. Введение

Высокоскоростное нагружение встречается во многих технологически важных приложениях, включая высокоскоростную обработку и формовку материалов, создание ударостойких материалов, пробивание защитных оболочек, ударное повреждение авиационных и космических летательных аппаратов и конструкций. Механический отклик многих материалов (металлов, керамик, стекол, полимеров) при высокоскоростном деформировании отличается от случая статических нагрузок. Так, для многих металлов зависимость напряжения течения от скорости деформирования резко усиливается, с превышением скорости деформирования $\approx 10^3 - 10^4 \text{ s}^{-1}$ [1,2]. Данное явление можно интерпретировать как следствие изменения механизма движения дислокаций.

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 отличие от области термофлуктуационной подвижности скорость дислокаций в динамической области падает с температурой в соответствии с увеличением плотности газа элементарных возбуждений. Поэтому при очень высоких скоростях деформирования для некоторых материалов наблюдается (аномальное) возрастание напряжения течения с увеличением температуры [1].

Использование при моделировании отклика вещества на высокоскоростное нагружение феноменологических моделей пластичности не позволяет автоматически учитывать перечисленные особенности пластического течения. Это делает актуальным разработку методов и подходов, опирающихся на рассмотрение движения дислокаций, элементарных носителей пластичности.

В настоящей работе для описания кинетики пластической деформации предложен подход, включающий в себя два пространственно-временных уровня описания.

1) Атомистический уровень. Для описания элементарных процессов пластической деформации используется молекулярно-динамическое (МД) моделирование. Исследуется поведение одиночной дислокации под действием сдвиговых напряжений. На основе анализа результатов предложено соотношение, описывающее динамику дислокаций. Данный метод позволяет описать движение дислокаций с учетом атомного строения их ядер и рассмотреть влияние тепловых колебаний атомов.

2) Макроскопический уровень представляет собой континуальную модель механически сплошной среды с дислокациями. В модели формулируется самосогласо-

ванная система уравнений для описания упругопластической деформации металла и эволюции дислокационной подсистемы. При рассмотрении динамики дислокаций используются результаты МД-моделирования.

Такой подход позволяет значительно выйти за рамки пространственных и временных масштабов, доступных МД-методам. В то же время использование при непрерывном описании информации об элементарных процессах на атомистическом уровне, полученной с помощью молекулярной динамики, позволяет сократить число определяющих свободных параметров.

На основе предложенного подхода проведено численное исследование эволюции дислокационной подсистемы при ударно-волновом нагружении алюминиевой мишени. Исследовано поведение динамического предела текучести с ростом температуры, результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными [3].

2. Многомасштабный подход

2.1. Молекулярная динамика. К настоящему времени существует три варианта МД-моделей (с разными граничными условиями), позволяющих изучать подвижность единичных дислокаций [4]. В наших расчетах за основу был взят вариант модели, предложенный в работе [5], где периодические граничные условия применяют не только вдоль оси краевой дислокации, но также и вдоль направления вектора Бюргера дислокации \mathbf{b} . В этом случае систему можно представить как массив дислокаций, периодически повторяющихся в пространстве. Применимость такой модели и требования к размерам расчетной ячейки для моделирования единичных дислокаций подробно обсуждаются в [4].

На рис. 1 представлена схема расчетной ячейки, соответствующая этой модели. Направления осей ориентированы соответственно одной из систем скольжения,

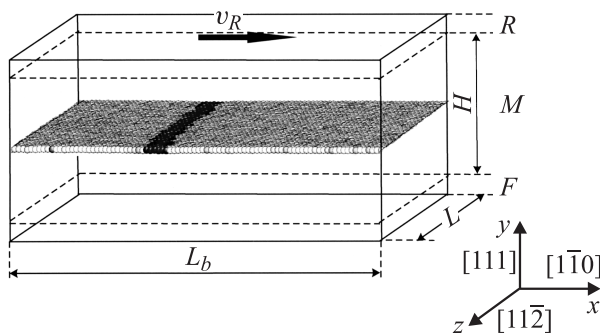


Рис. 1. Схема модели для расчета поведения дислокации в ГЦК-кристалле под действием сдвига. Показаны только атомы, находящиеся в плоскости скольжения дислокаций. Темные атомы — дефект упаковки между двумя частичными дислокациями. M — часть ячейки со свободными атомами, F — область с фиксированными атомами, R — область атомов в виде абсолютно твердого тела, которая движется в направлении оси x с заданной скоростью v_R .

типичной для ГЦК-решетки, какой обладает алюминий, а именно $[1\bar{1}0]$ (111). Вектор Бюргера полной краевой дислокации, обеспечивающей такое скольжение, будет $\mathbf{b} = a/2[1\bar{1}0]$ (направление совпадает с осью x). Скольжение дислокации происходит в плоскости xz , т.е. (111). Линия краевой дислокации совпадает с осью z . Периодические граничные условия действуют вдоль осей x и z . Подвижные частицы расчетной ячейки составляют блок M (его размеры $L_b \times H \times L$). Для создания сдвиговых напряжений σ_{xy} используется несколько крайних атомных слоев, состоящих из частиц, неподвижных друг относительно друга. Положение трех атомных слоев у нижней границы (F) фиксируется на месте, в то время как слои у верхней границы (R) двигаются вдоль оси x под действием заданной внешней силы F_x (напрямую, [6]) либо с постоянной заданной скоростью v_R . Таким образом, в первом случае непосредственно контролируется сдвиговое напряжение, во втором — деформация.

Для создания дислокации используется следующая процедура.

а) В идеальной кристаллической структуре удаляются две соседние атомные полуплоскости ($1\bar{1}0$).

б) При небольшом сжатии кристалла происходит сближение атомных плоскостей, находящихся по разные стороны от места выреза; координаты атомов по осям y и z при этом фиксируются (т.е. движение атомов происходит вдоль оси x).

в) Производятся снятие ограничения на движение вдоль оси x для частиц блока M , „замораживание“ частиц в блоках R и F , релаксация образовавшейся структуры методом минимизации потенциальной энергии.

д) И наконец, осуществляется релаксация с выводом на заданные температуру и давление.

Отметим важность третьего этапа описанной процедуры, поскольку на нем происходит процесс расщепления полной дислокации, энергетически менее выгодной для ГЦК-решетки, на две частичные краевые дислокации:

$$\frac{a}{2} [1\bar{1}0] \rightarrow \frac{a}{6} [2\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6} [1\bar{2}1].$$

Поскольку атомы в ядре дислокации, а также в промежутке между разбежавшимися частичными дислокациями образуют дефекты в упаковке ГЦК-решетки, их можно успешно выделять на основании параметров, характеризующих ближайшее окружение частицы. Анализ движения дислокаций проводится на основании расчета координационного числа K_i и (локального) параметра центральной симметрии для каждого атома CS_i [7]. Результатом подобного расчета является положение ядер двух частичных дислокаций на оси x в зависимости от времени.

Подвижность дислокаций в зависимости от сдвигового напряжения удобно изучать, смещая блок атомов R с некоторой постоянной скоростью v_R , в то время как блок F остается зафиксированным. При таком способе

деформирования скорость дислокаций V в стационарном режиме определяется скоростью деформирования $V = v_R L_b / b$. Мгновенная величина напряжения σ_{xy} рассчитывается из теоремы вириала.

При МД-моделировании использовался потенциал межчастичного взаимодействия [8], разработанный на основе метода погруженного атома для описания свойств алюминия и его сплавов с медью. Часть потенциала, относящаяся к алюминию, эквивалентна широко используемому потенциалу [9], хорошо воспроизводящему упругие модули алюминия, энергии различных дефектов упаковки, фоннный спектр. Расчеты проводились с помощью пакета параллельных программ LAMMPS [10].

2.2. Механика сплошной среды с динамикой дислокаций. Для описания макроскопического движения вещества мишени используется континуальная модель. Ансамбль дислокаций в каждой точке среды характеризуется скалярной плотностью ρ_D и скоростью \mathbf{V} движения дислокаций относительно вещества. Систему уравнений механики сплошной среды дополним уравнениями для определения ρ_D и \mathbf{V} , а также для тензора пластической дисторсии w_{ik}^{pl} , учитывающего релаксацию сдвиговых напряжений при движении дислокаций.

Рассмотрим сначала определяющие уравнения для средних (макроскопических) механических напряжений, получаемых усреднением по объему вещества, содержащему большое число дислокаций. Тензор w_{ik}^{pl} описывает среднее упругое поле в кристалле, связанное с наличием дислокаций [11]. Упругая дисторсия в среде определяется разностью $w_{ik} = W_{ik} - w_{ik}^{pl}$. Здесь W_{ik} — тензор полной геометрической дисторсии, он связан с геометрическим смещением точек среды, его изменение во времени определяется как $dW_{ik}/dt = \partial u_k / \partial x_i$, где \mathbf{u} — массовая скорость среды. Изменение тензора пластической дисторсии w_{ik}^{pl} может быть найдено как $dw_{ik}^{pl}/dt = -e_{ilm} V_l \tau_m b_k \rho_D$ [11], здесь e_{ilm} — единичный антисимметричный тензор, $\boldsymbol{\tau}$ — единичный касательный к дислокационной линии вектор, \mathbf{b} — вектор Бюргерса. Отметим, что в приведенных выражениях в отличие от [11] используются полные производные по времени, вычисленные в лагранжевой системе координат, движущейся вместе с веществом.

Представим тензор напряжений в виде суммы $\sigma_{ik} = -P\delta_{ik} + S_{ik}$, где P — шаровая часть напряжений (давление), S_{ik} — тензор девиаторов напряжений. Давление связано с изменением объема среды, девиаторы напряжений связаны с изменением формы и характеризуют касательные напряжения. Будем рассматривать движение дислокаций только в плоскости скольжения, определяемой векторами \mathbf{b} и $\boldsymbol{\tau}$, поскольку выход дислокации из плоскости скольжения является медленным процессом. При скольжении дислокаций пластическая деформация не приводит к изменению объема среды [11], поэтому для давления может использоваться какое-либо известное широкодиапазонное уравнение состояния $P = P(\rho, E)$, например [12]. Здесь ρ — массовая

плотность среды, E — удельная внутренняя энергия. Для скорости изменения девиаторов напряжений аналогично [13] запишем закон Гука

$$\frac{dS_{ik}}{dt} = G \left(\frac{dw_{ik}}{dt} + \frac{dw_{ki}}{dt} - \frac{2}{3} \frac{dw_{ll}}{dt} \delta_{ik} \right),$$

где G — модуль сдвига. Данные по зависимости модуля сдвига от температуры взяты из [14].

Рассмотрим прямолинейный сегмент дислокационной линии, движущейся в поле напряжений. Запишем уравнение движения дислокации в форме второго закона Ньютона, все величины будем относить к единице длины дислокации. Для массы дислокации [11,15,16] с учетом релятивистского эффекта можно записать $m = m_0 / \sqrt{1 - V^2/c_t^2}$, где $c_t = \sqrt{G/\rho}$ — поперечная скорость звука. Масса покоящейся дислокации m_0 может быть оценена как $m_0 = \rho b^2 / (2\pi) \ln(R/b)$, где R — радиус кривизны дислокации или характерный размер прямолинейного участка дислокации. Взяв для оценки $R \approx 1 \mu\text{m}$, получаем $m_0 \approx 2.5 \cdot 10^{-16} \text{ kg/m}$. На основе данных [16], а также по результатам МД-моделирования, проведенного в рамках настоящей работы, $m_0 \leq 10^{-16} \text{ kg/m}$ (масса дислокации может быть оценена по времени установления стационарного режима движения дислокации). В результате мы использовали значение $m_0 = 10^{-16} \text{ kg/m}$. Отметим, что для рассматриваемых ударно-волновых процессов уменьшение массы дислокации по сравнению с этой величиной не влияет на результат моделирования, поскольку движение дислокаций успевает выходить на стационарный режим.

Силы, действующие на дислокацию, можно условно разделить на две группы: 1) силы со стороны среднего макроскопического поля напряжений; 2) силы сопротивления движению дислокации, связанные либо с атомарным строением вещества (рельеф Пайерлса [17], взаимодействием дислокации с фононами и электронами [2,17]), либо с взаимодействием с другими дислокациями [17,18]. Силы первой группы описываются формулой Питча–Кёлера [11,19]. Обозначим через \mathbf{F} составляющую этих сил, лежащую в плоскости скольжения дислокации, для нее можно записать [19]

$$F_i = \kappa_i b_\rho e_{msr} \tau_s \kappa_r \sigma_{mp}, \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\kappa}$ — орт в плоскости скольжения, перпендикулярный дислокационной линии.

Рассмотрим силы второй группы. Движению дислокации препятствует сила \mathbf{F}^{SF} , связанная с рельефом Пайерлса, с наличием точечных дефектов и других дислокаций [17]. Данная сила играет роль силы трения покоя и подавляет пластическое деформирование вплоть до достижения касательными напряжениями критической величины, которая для простого растяжения равна половине предела текучести. Поэтому можно записать $\mathbf{F}^{SF} = -bY\boldsymbol{\kappa}/2$, где Y — предел текучести, определяемый текущим состоянием дефектной подсистемы материала. Величина предела текучести Y зависит от плотности дислокаций, что может быть описано тейлоровским

законом упрочнения [17]

$$Y = Y_0 + \alpha Gb\sqrt{\rho_D}, \quad (2)$$

где Y_0 включает в себя сопротивления со стороны точечных препятствий и барьера Пайерлса, α — постоянная междислокационного взаимодействия. Использовались значения $Y_0 = 22$ МПа, $\alpha = 0.4$ [20].

При высокоскоростной деформации в ударной волне скольжение дислокаций будет происходить лишь при $|\mathbf{F}| > |\mathbf{F}^{SF}|$, поскольку термофлуктуационный механизм преодоления препятствий не успевает срабатывать в отличие от случая квазистатической деформации, когда энергетический барьер (работа против силы \mathbf{F}^{SF}) может преодолеваться за счет тепловых флуктуаций.

При превышении сил со стороны среднего упругого поля силы трения покоя дислокация начинает двигаться. В результате возникает дополнительная сила вязкого трения — $B\mathbf{V}$, связанная с рассеянием фононов и электронов на движущемся ядре дислокации [2,17], где B — коэффициент трения. Зависимость коэффициента трения от температуры среды и скорости дислокации $B(V, T)$ находилась нами по результатам МД-моделирования, выполненного в рамках настоящей работы. Таким образом, уравнение движения дислокации

$$\frac{m_0}{(1 - V^2/c_t^2)^{3/2}} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{F} - \frac{1}{2} bY_{\kappa} - B(V, T)\mathbf{V}. \quad (3)$$

Запишем уравнение для изменения плотности дислокаций

$$\frac{d\rho_D}{dt} + \rho_D \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = \left(\delta_0 \frac{Y_0}{Gb} + \delta_f \sqrt{\rho_D} - k_a b \rho_D \right) |\mathbf{V}| \rho_D + Q_T. \quad (4)$$

Слагаемые в скобках в правой части уравнения (4) взяты из работ [21,22], они учитывают генерацию дислокаций на препятствиях недеформационного и деформационного характера (первые два слагаемых в скобках соответственно) и их аннигиляцию (последнее слагаемое). Также уравнение (4) включает термофлуктуационный источник дислокаций Q_T , вид которого обсуждается далее. При отсутствии источников и стоков дислокаций полная длина дислокаций в каждом элементе объема среды должна сохраняться, при этом плотность дислокаций (длина в единице объема) будет меняться при сжатии-расширении вещества, что учтено в левой части уравнения (4). Оценки показали, что пробег дислокаций по материалу мишени при прохождении ударной волны и последующей волны разрежения составляет порядка $1 \mu\text{m}$, что существенно меньше как размера мишени, так и ширины фронта ударной волны (десятки μm). Поэтому в уравнении (4) мы пренебрегли конвективным слагаемым, ответственным за перенос дислокаций.

Для констант модели генерации дислокаций на препятствиях использовались те же значения, что и при описании квазистатического деформирования [23]: $\delta_0 = 2 \cdot 10^{-2}$, $\delta_f = 1 \cdot 10^{-2}$. Коэффициент аннигиляции

дислокаций k_a зависит от температуры T , для ГЦК-металлов может быть представлен как [23]

$$k_a(T, \gamma_D) = \frac{k_0 G}{\tau_0} \exp \left[\left(1 + 180 \frac{\gamma_D}{Gb} \right) \frac{kT}{0.35 Gb^3} \ln \left(\frac{\dot{\gamma}_0}{\dot{\gamma}} \right) \right]. \quad (5)$$

Здесь γ_D — энергия дефекта упаковки; для чистого алюминия характерны значения $\tau_0/G = 10^{-3}$, $k_0 \approx 3.98 \cdot 10^{-3}$; под логарифмом $\dot{\gamma}$ — скорость деформации, $\dot{\gamma}_0$ — предэкспоненциальный множитель. В [23] для квазистатического нагружения (характерные скорости деформаций $\dot{\gamma} \approx 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) использовалось значение $\ln(\dot{\gamma}_0/\dot{\gamma}) = 35$, при прохождении ударной волны скорость деформации достигает 10^7 s^{-1} , поэтому значение логарифма мы полагали равным $\ln(\dot{\gamma}_0/\dot{\gamma}) = 10$.

В чистом кристалле, подверженном воздействию интенсивных сдвиговых напряжений, возможно возникновение дислокаций за счет тепловых флуктуаций, запишем соответствующий источник Q_T для уравнения (4). Из сохранения суммарного вектора Бюргерса следует, что дислокации должны образовываться парами с взаимно противоположным направлением вектора Бюргерса. Образовавшаяся в результате флуктуации виртуальная пара дислокаций в ненагруженном кристалле будет неустойчивой, и спустя время порядка $\tau_f = D/c_t$ они взаимно уничтожатся, здесь $D = L/\pi$ — диаметр дислокационной петли, L — ее длина. В нагруженном кристалле дислокации начнут двигаться в противоположных направлениях и за время $\tau_b = b/(2V)$ разойдутся на расстояние b . Если для данной пары $\tau_f \geq \tau_b$, то виртуальная пара не уничтожается, а становится источником дислокаций. Это условие накладывает ограничение снизу на длину образующихся в результате флуктуаций дислокаций: $L \geq L_c = \pi b c_t / (2V)$. С другой стороны, чем меньше длина дислокации, тем меньшая работа требуется на ее образование и тем больше вероятность соответствующей флуктуации. Поэтому наиболее активно должно происходить образование дислокаций с минимально допустимой (критической) длиной L_c . Работа образования пары дислокаций критической длины равна $\delta A = L_c \varepsilon_D$, ε_D — энергия образования на единицу длины. Вероятность такой флуктуации $\sim \exp(-\delta A/(kT))$ [24], количество очагов в единице объема можно оценить как $1/D^3$, частоту событий — как $1/\tau_f$. Перемножая эти три фактора и умножая на длину пары $2L_c$, получаем мощность термофлуктуационного источника дислокаций

$$Q_T = \frac{2\pi^4 c_t}{L_c^3} \exp \left(-\frac{L_c \varepsilon_D}{kT} \right). \quad (6)$$

Для энергии образования на единицу длины мы использовали значение $\varepsilon_D = 0.8 \text{ eV/b}$, что соответствует удвоенной энергии ядра дислокации [18]. Отметим, что эта энергия отличается от полной (с учетом упругой) энергии дислокационной петли, используемой при рассмотрении гомогенного зарождения [15]. Увеличение касательных напряжений приводит к росту скорости

дислокаций V , уменьшению критической длины L_c и активизирует термофлуктуационный источник (6).

В экспериментах по ударному нагружению толщины и поперечные размеры образца и ударника обычно выбирают таким образом, чтобы реализовывались условия одноосной деформации. Поэтому перейдем к рассмотрению одномерной декартовой геометрии, ось Oz системы координат направим в глубь вещества. Отличными от нуля будут только диагональные компоненты тензора напряжений: σ_{zz} и $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$. Зададим ориентацию плоскости скольжения дислокации нормалью, определяемой углами θ и φ . Положение \mathbf{b} и $\boldsymbol{\tau}$ в плоскости скольжения зададим углами ξ и ψ соответственно. В принятых обозначениях уравнение движения дислокации (3) с учетом (1) в проекции на $\boldsymbol{\kappa}$ примет вид

$$\frac{m_0}{(1 - V^2/c_T^2)^{3/2}} \frac{dV}{dt} = -\frac{3}{4} b \left(S_{zz} \sin 2\theta \cos \psi \pm \frac{2}{3} Y \right) - B(V, T)V. \quad (7)$$

Изменение компоненты тензора пластической дисторсии

$$\frac{dw_{zz}^{pl}}{dt} = -\frac{bV\rho_D}{2} \sin 2\theta \cos \psi. \quad (8)$$

У алюминия как материала с ГЦК-структурой активироваться в первую очередь будет система скольжения (111) [110] [15]. В экспериментах [3] удар происходил в направлении [001]. Тогда для ориентации плоскости скольжения получаем $\cos \theta = 1/\sqrt{3}$; для ориентации вектора Бюргерса $\psi = \pi/6$.

Окончательно запишем в лагранжевых координатах систему уравнений механики сплошной среды с учетом динамики дислокаций

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\frac{\partial u}{\partial z}, \quad (9)$$

$$\rho \frac{du}{dt} = \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}, \quad (10)$$

$$\rho \frac{dE}{dt} = -\frac{\sigma_{zz}}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (11)$$

$$\sigma_{zz} = -P(\rho, E) + S_{zz}, \quad (12)$$

$$\frac{dS_{zz}}{dt} = \frac{4}{3} G \frac{\partial u}{\partial z} - 2G \frac{dw_{zz}^{pl}}{dt}. \quad (13)$$

$$\frac{dw_{zz}^{pl}}{dt} = -\frac{1}{\sqrt{6}} V b \rho_D, \quad (14)$$

$$\frac{m_0}{(1 - V^2/c_T^2)^{3/2}} \frac{dV}{dt} = -\frac{3}{4} b \left(\sqrt{\frac{2}{3}} S_{zz} \pm \frac{2}{3} Y \right) - B(V, T)V. \quad (15)$$

Здесь K — коэффициент теплопроводности. Система уравнений (9)–(15) должна быть дополнена кинетическим уравнением для дислокаций (4) и законом упрочнения (2).

Система уравнений решалась численно. Для уравнений механики сплошных сред (9)–(11) использовалась разностная схема, предложенная в [25]. Уравнения (4) и (13)–(15) интегрировались по времени явной схемой Эйлера. Давления и другие термодинамические параметры определялись из широкодиапазонного уравнения состояния [12].

3. Результаты и обсуждение

3.1. Динамическое торможение дислокаций. Движение дислокаций под действием сдвиговых напряжений определяется уравнением (3). Молекулярно-динамические расчеты направлены на определение значений параметров, входящих в это уравнение, а именно коэффициента фононного трения B в зависимости от скорости и температуры. В стационарном режиме динамического торможения дислокации уравнение (3) принимает вид

$$(\sigma_\tau - \sigma_0)b = B(V, T)V, \quad (16)$$

где $b \approx 2.8 \text{ \AA}$ — величина вектора Бюргерса дислокации. По зависимости σ_τ от V можно определить коэффициент фононного трения B .

Для исследования движения дислокации в стационарном режиме использовалась модель, представленная на рис. 1. В процессе перемещения верхней части атомов R возникают сдвиговые деформации и напряжение. На рис. 2 показана зависимость сдвиговых напряжений и скорости дислокации от времени. На начальном участке, пока скорость дислокации небольшая, сдвиговые напряжения нарастают быстро за счет упругой внешней деформации. По мере увеличения сдвиговых напряжений возрастает скорость дислокации, и скорость пластической

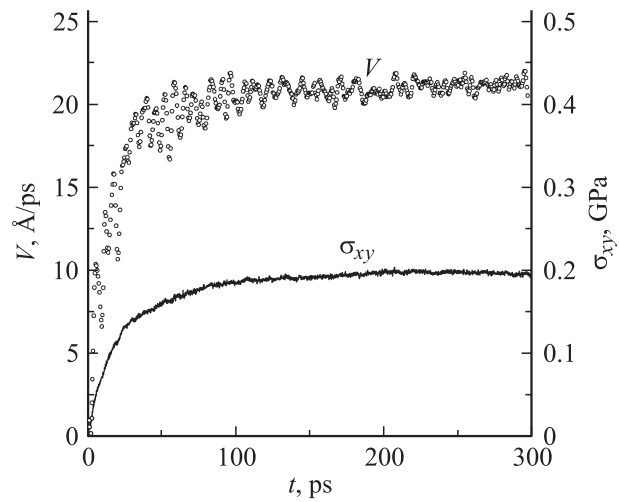


Рис. 2. Зависимость скорости дислокации (точки) и сдвиговых напряжений (сплошная линия) от времени в процессе деформирования с постоянной скоростью. Температура $T = 500 \text{ K}$. Скорость верхней части атомов $v_R = 0.105 \text{ \AA/ps}$.

деформации стремится к скорости упругой. Со временем наблюдается выход на стационарный режим, когда упругая деформация компенсируется пластической. При этом скорость дислокации постоянна и примерно равна $V \approx v_R L_b / b$, также постоянны сдвиговые напряжения (рис. 2). Время выхода на стационарный режим зависит от скорости деформирования и лежит для рассматриваемых в работе расчетов в диапазоне от 50 ps до 1 ns.

Рассчитанные МД-методом зависимости скорости дислокации V от сдвигового напряжения σ_τ для нескольких температур (вплоть до температуры плавления) представлены на рис. 3. Во всем исследованном диапазоне увеличение температуры приводит к уменьшению скорости дислокации; таким образом, движение дислокаций не требует термоактивации: имеет место динамический режим с фоновым трением. Движение лимитируется перекачкой энергии от дислокации к элементарным возбуждениям в кристалле. Четко 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_τ ограничиваются линейным участком. При рассмотрении ударно-волнового нагружения на фронте ударной волны могут возникать большие сдвиговые напряжения, и в этом случае необходима аппроксимация всей зависимости, с учетом асимптотической ветви.

Для описания нелинейной зависимости V от V в литературе вводятся релятивистские поправки. При этом возможны различные степени поправки [26]:

$$B(V) = \frac{B_0}{(1 - (V/c_t)^2)^n},$$

где n — некоторая степень.

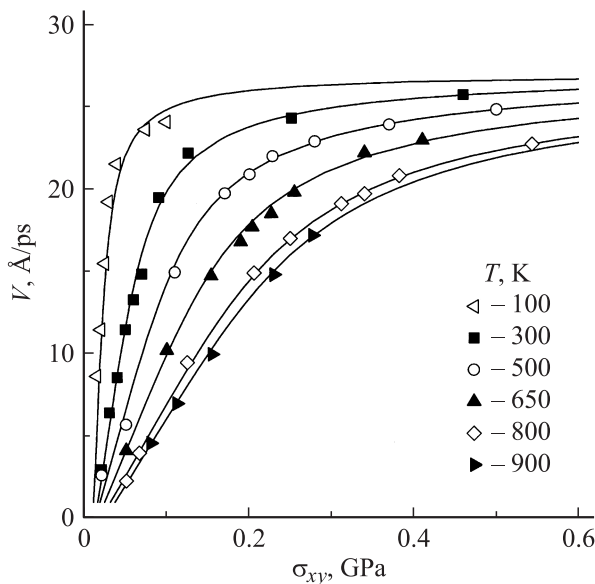


Рис. 3. Зависимость скорости движения дислокации V от сдвигового напряжения σ_{xy} . Сплошные линии — аппроксимации по формуле (17).

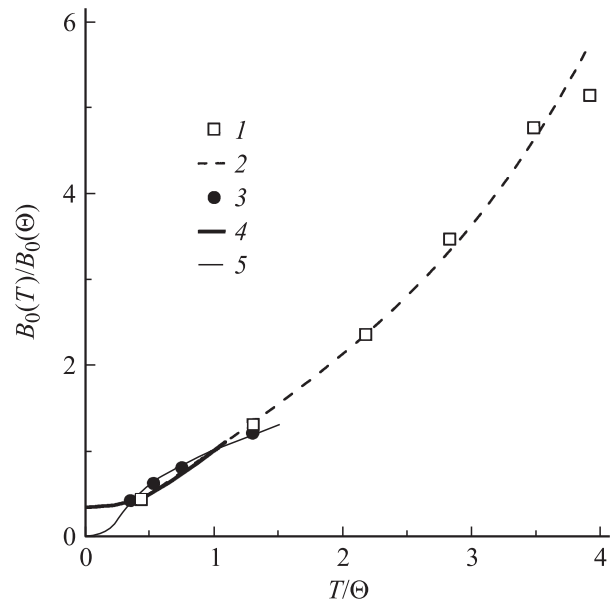


Рис. 4. Температурная зависимость коэффициента динамического торможения дислокаций $B_0(T)$. Значения температуры и коэффициента торможения для алюминия из МД-расчетов нормированы на температуру $\Theta = 230$ К и величину $B_0(\Theta)$ соответственно. 1 — молекулярная динамика, 2 — аппроксимация данных МД по формуле (18), 3 — эксперимент [28], 4 — эксперимент [27], 5 — теоретическая зависимость [2].

Но используя такую зависимость, не всегда удается описать одновременно линейную и асимптотическую ветви (например, при 300 и 500 К). Хорошо аппроксимирует всю совокупность кривых (рис. 3) следующая зависимость:

$$(\sigma_\tau - \sigma_0)b = \frac{B_0 V}{1 - (V/c_{\text{disl}})^4}. \quad (17)$$

В качестве c_{disl} используется одно и то же значение 2700 м/с для всех рассмотренных температур. Предельной скоростью, с которой могут распространяться малые возмущения в среде, является скорость звука. Скорость звука определялась из модуля сдвига $c = \sqrt{C_{44}/\rho}$ при расположении кристаллографических направлений, как на рис. 1. Для температур $T = 300, 900$ К скорость звука равна $c \approx 3100, 2600$ м/с соответственно. В одном случае c_{disl} значительно меньше скорости звука, а в другом — даже больше. Возможно, такая аппроксимация плохо описывает результаты в области больших напряжений, но в области сдвиговых напряжений $\sigma_\tau < 0.6$ ГПа при всех температурах точки хорошо ложатся на аппроксимацию.

На основании приведенных данных была определена температурная зависимость коэффициента торможения $B_0(T)$. Она представлена на рис. 4 в безразмерном виде: температурой T , нормированной на температуру Θ (порядка дебаевской, см. [2]), и коэффициентом $B_0(T)$ — на соответствующее значение коэффициента $B_0(\Theta)$. Для алюминия использовано значение $\Theta = 230$ К. Для срав-

нения приведены экспериментальные данные, взятые из работ [27,28], и теоретическая зависимость из [2].

Значительное расхождение результатов МД-моделирования как с теоретическими, так и с экспериментальными данными в области низких температур объясняется тем, что в металлах при низких температурах фонный газ оказывается выморожен и существенным становится взаимодействие движущихся дислокаций с электронами проводимости. Данный эффект, связанный с электронной подсистемой, может сказаться лишь в небольшой области около $T = 0$ К и не принимается во внимание ни в теории фонного трения дислокаций, ни в МД-модели.

В области умеренных температур зависимость практически линейная. Такой ход кривой $B_0(T)$ описывается в рамках существующих теорий фонного трения [2].

Абсолютное значение коэффициента торможения дислокации при 300 К, определенное из обработки МД-расчетов, составило приблизительно $0.9 \cdot 10^{-5}$ Па·с, что близко к экспериментальным значениям. По оценкам различных экспериментов оно варьируется от $0.5 \cdot 10^{-5}$ Па·с (затухание ультразвука [27]) и $2.6 \cdot 10^{-5}$ Па·с (подвижность дислокаций [28]) до $17 \cdot 10^{-5}$ Па·с (затухание ультразвука; см. обзор [2]). Значения коэффициента торможения из различных экспериментов систематически отличаются друг от друга, что может объясняться различием используемых методик и физической неэквивалентностью образцов. Поэтому вид температурной зависимости $B_0(T)$ различных экспериментов удобнее сравнивать именно в безразмерном виде [2], подбирая параметры Θ , $B_0(\Theta)$ индивидуально.

С ростом температуры сказываются отклонения от линейного закона. Отклонение от линейности хорошо описывается функцией четвертой степени

$$\frac{B_0(T)}{B_0(\Theta)} = \frac{T}{\Theta} + 0.0077 \left(\frac{T}{\Theta} \right)^4. \quad (18)$$

Таким образом, с помощью метода молекулярной динамики получены результаты, необходимые для описания движения дислокаций и включения их в макроскопическое описание пластической деформации.

3.2. Эволюция ансамбля дислокаций в условиях высокоскоростного нагружения. На основе макроскопического моделирования с использованием динамики дислокаций можно получить обширную информацию об эволюции дислокационной подсистемы: плотность дислокаций, их скорость, роль различных источников зарождения. Для верификации предложенного подхода проводилось численное моделирование экспериментов [3] по распространению ударных волн в монокристаллическом алюминии при различных температурах испытаний, при этом моделирование дает существенно более полную информацию о протекающих процессах. Алюминиевый ударник толщиной 0.4 mm со скоростью $u = 640\text{--}660$ m/s бил по алюминиевому

образцу толщиной 2.9 mm. На рис. 5 приведены временные зависимости скорости свободной поверхности мишени u_{fs} . Вначале на свободную поверхность мишени выходит упругий предвестник. Далее следует фронт пластической волны, а за ним волна разрешения. Запоздывание пластической волны относительно упругого предвестника определяется величиной модуля сдвига G .

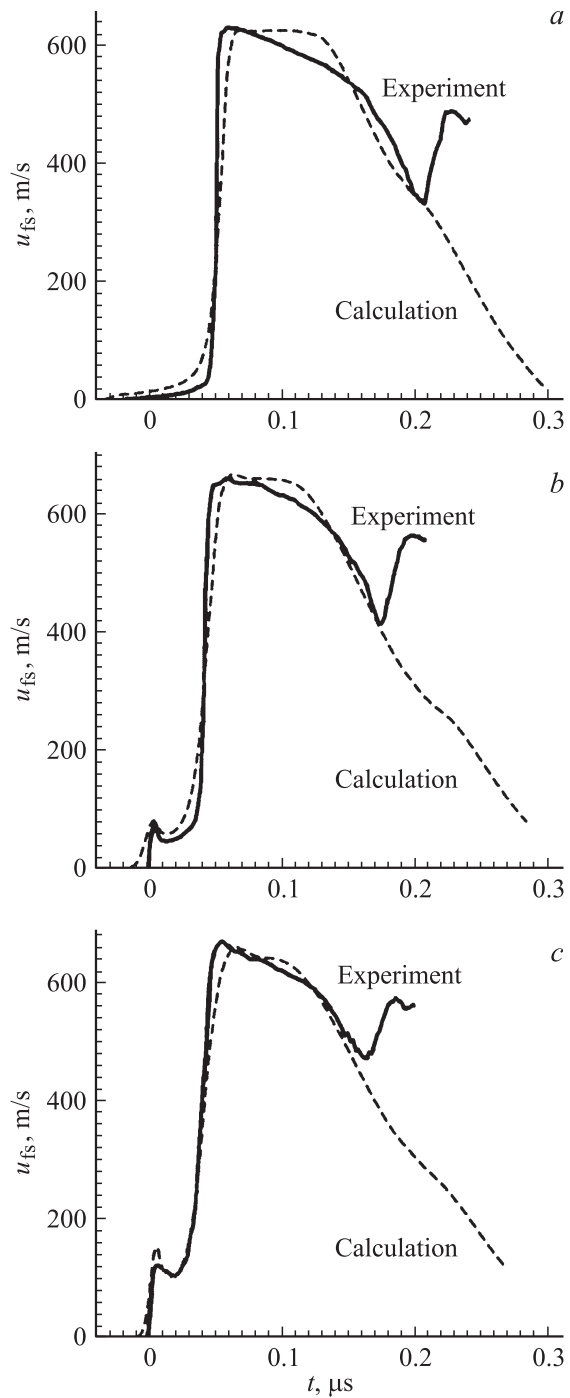


Рис. 5. Скорость тыльной поверхности алюминиевой мишени: эксперимент [3] и расчеты (время отсчитывается начиная с момента выхода на поверхность ударной волны) при различных температурах. T , К: a — 293, b — 680, c — 923.

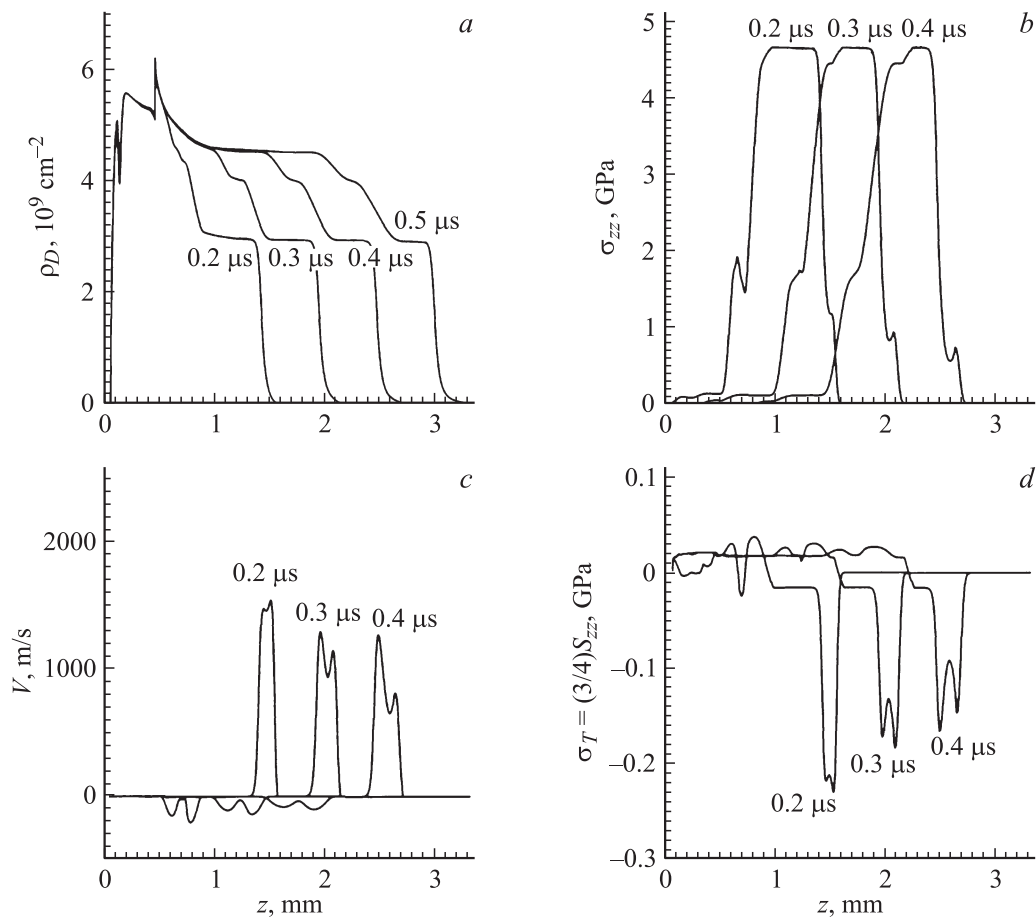


Рис. 6. Распределение по глубине мишени скалярной плотности дислокаций (*a*), напряжений (*b*), скорости движения дислокаций (*c*) и касательных напряжений (*d*) для последовательных моментов времени (время отсчитывается начиная с момента удара). $T = 680 \text{ K}$.

Нами использовалась температурная зависимость модуля сдвига на основе данных [14].

При отражении ударной волны от свободной поверхности мишени формируется вторая волна разрежения, а суперпозиция двух волн разрежения приводит к появлению растягивающих напряжений (области отрицательного давления) в материале мишени. При достаточно большой величине этих напряжений в экспериментах происходит разрушение мишени, что фиксируется по резкому росту скорости свободной поверхности. В расчетах модель разрушения не закладывалась.

При повышенных температурах за фронтом упругого предвестника и в расчетах и в эксперименте наблюдается падение напряжений и, как следствие, скорости свободной поверхности. Оно связано с интенсивной генерацией дислокаций, что увеличивает скорости пластической релаксации касательных напряжений. При дальнейшем росте плотности дислокаций падение касательных напряжений сменяется их ростом, что обусловлено деформационным упрочнением алюминия (см. соотношение (2)). При комнатной температуре дислокации способны двигаться с существенно более высокими скоростями, чем при повышенных температурах, за счет меньшей действующей на них силы трения. В результате

плотность дислокаций, нарабатываемая на фронте упругой волны, оказывается достаточной для эффективного снятия касательных напряжений, и падения напряжений за фронтом предвестника не наблюдается, но наблюдается рост напряжений вследствие деформационного упрочнения.

Начальная плотность дислокаций в мишенях во всех случаях полагалась равной $\rho_D = 10^7 \text{ cm}^{-2}$ (по данным [28] плотность дислокаций в монокристаллическом алюминии при нормальных условиях составляет $10^6 - 10^7 \text{ cm}^{-2}$). Расчеты показывают, что при данных условиях основным фактором роста плотности дислокаций на фронте упругого предвестника является их термофлуктуационное зарождение. Малая начальная плотность дислокаций предполагает высокий уровень касательных напряжений, что обеспечивает эффективную работу термофлуктуационного источника. Именно этот механизм определяет высоту пика в упругом предвестнике. Далее за счет плотности дислокаций касательные напряжения падают, мощность термофлуктуационного источника резко уменьшается и основным механизмом генерации дислокаций становится их размножение на препятствиях деформационного и недеформационного

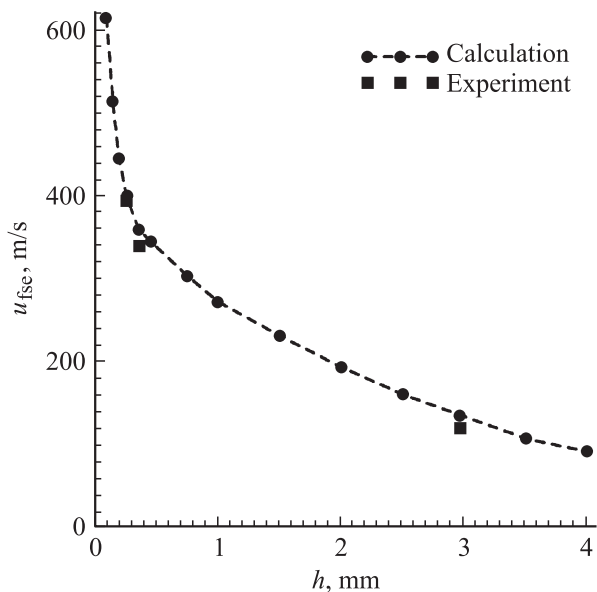


Рис. 7. Зависимость скачка скорости U_{fsc} в упругом предвестнике от толщины пластины-мишени. Экспериментальные данные [3] и расчеты.

характера (см. (4)) аналогично квазистатическому случаю [21,22].

В целом прохождение ударной волны увеличивает плотность дислокаций до величины порядка $3 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$, а следующая за ней волна разрежения поднимает плотность дислокаций еще в 1.5 раза (рис. 6, *a*), причем эти величины слабо зависят от начальной температуры мишени. Максимум в распределении скалярной плотности дислокаций соответствует месту контакта ударника и мишени. Отметим, что начальная температура пластины-ударника во всех расчетах принималась равной 293 К, в то время как начальная температура пластины-мишени менялась. Поэтому плотности дислокаций на рис. 6, *a* в области ударника и в области мишени различаются.

На рис. 6, *b* приведены распределения механических напряжений в последовательные моменты времени. Видно, что амплитуда упругого предвестника уменьшается по мере распространения ударной волны в глубь мишени, что связано с уменьшением скорости деформаций на фронте волны. На рис. 6, *c* представлены рассчитанные скорости движения дислокаций. Наблюдается два выраженных локальных максимума скорости дислокаций, первый из них соответствует фронту упругого предвестника, второй — фронту пластической волны. Быстрый рост касательных напряжений на фронте волны и конечная скорость пластической релаксации приводят к движению дислокаций со скоростями более 1000 м/с. При этом сами касательные напряжения достигают величины более 0.2 ГПа (рис. 6, *d*). К моменту прихода волны разрежения плотность дислокаций в материале уже достаточно велика, в результате скорости дислокаций в волне разрежения не превышают нескольких сотен

метров в секунду, а касательные напряжения близки к пределу текучести.

Численно исследовано затухание упругого предвестника с глубиной. На рис. 7 приведены зависимости скачка скорости в упругом предвестнике от толщины мишени в сравнении с результатами [3]. В [3] ударная волна инициировалась импульсом мощного протонного пучка на установке KALIF. В наших расчетах воздействие мощного протонного пучка моделировалось ударом со скоростью 800 м/с пластинки-ударника толщиной 60 μm , что обеспечило близкую к эксперименту ширину импульса нагрузки. Видно, что на малых глубинах затухание идет очень быстро, затем скорость затухания резко убывает. Такое поведение соответствует также экспериментальным результатам [29] для затухания упругого предвестника в LiF. Следует отметить, что без учета термофлуктуационного источника генерации дислокаций (6) не удастся правильно описать затухание упругого предвестника, что свидетельствует о важной роли данного механизма в процессах на фронте ударной волны.

4. Заключение

В настоящей работе информация о движении единичной дислокации под действием касательных напряжений, полученная методом молекулярной динамики, использовалась для описания поведения ансамбля дислокаций на макроскопическом уровне. Это позволило описать упругопластическое течение алюминия при ударно-волновых воздействиях и получить результаты, качественно и количественно соответствующие эксперименту. Таким образом, проведено апробирование предложенного подхода и продемонстрирована его применимость для предсказательного моделирования.

Проведенные исследования на основе предложенного подхода подтверждают важную роль динамики и кинетики дислокаций в описании динамического отклика материалов на высокоскоростные воздействия. Предельная скорость пластической деформации определяется как скоростью движения дислокаций, так и скоростью их генерации. Стоит отметить большую роль термофлуктуационных источников зарождения дислокаций на фронте ударной волны, в частности их влияние на затухание упругого предвестника. Помимо этого получена обширная информация об эволюции дислокационной подсистемы в процессе прохождения ударной волны, недоступная для прямого экспериментального наблюдения.

Для кинетики зарождения и размножения дислокаций в настоящее время используется эмпирический подход, основанный на известных в литературе уравнениях для скалярной плотности дислокаций, которые в свою очередь строятся на основе анализа экспериментальных данных. Продолжением настоящей работы должен стать молекулярно-динамический анализ процессов генерации дислокаций, что в перспективе позволит замкнуть описание упругопластического течения, без привлечения эмпирических констант.

Авторы выражают благодарность Г.И. Канелю и А.П. Яловцу за обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Г.И. Канель, В.Е. Форгов, С.В. Разоренов. УФН **177**, 809 (2007).
- [2] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. УФН **115**, 3 (1975).
- [3] G.I. Kanel, S.V. Razorenov, K. Baumung, J. Singer. *J. Appl. Phys.* **90**, 136 (2001).
- [4] Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon. *Model Simul. Mater. Sci. Eng.* **11**, 427 (2003).
- [5] M.S. Daw, S.M. Foiles, M.I. Baskes. *Mater. Sci. Rep.* **9**, 251 (1992).
- [6] А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ДАН **420**, 467 (2008).
- [7] C.L. Kelchner, S.J. Plimpton, J.C. Hamilton. *Phys. Rev. B* **58**, 11 085 (1998).
- [8] X.-Y. Liu, X. Wei, S.M. Foiles, J.B. Adams. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1578 (1998).
- [9] X.-Y. Liu, F. Ercolessi, J.B. Adams. *Model Simul. Mater. Sci. Eng.* **12**, 665 (2004).
- [10] S.J. Plimpton. *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995).
- [11] С.В. Косевич. УФН **84**, 579 (1964).
- [12] С.Н. Колгатин, А.В. Хачатурьянец. *Теплофизика высоких температур* **20**, 90 (1982).
- [13] М.Л. Уилкинс. В сб.: *Вычислительные методы в гидродинамике* / Под ред. Б. Олдера, С. Фернбаха, М. Ротенберга. Мир, М. (2007). С. 212.
- [14] J.L. Tallon, A. Wolfenden. *J. Phys. Chem. Solids* **40**, 831 (1979).
- [15] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972).
- [16] M.F. Horstemeyer, M.I. Baskes, S.J. Plimpton. *Acta Mater.* **49**, 4363 (2001).
- [17] Т. Судзуки, Х. Ёсинага, С. Такеути. *Динамика дислокаций и пластичность*. Мир, М. (1989). 294 с.
- [18] G. Ananthakrishna. *Phys. Rep.* **440**, 113 (2007).
- [19] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости*. Наука, М. (1987). 248 с.
- [20] Т. Свенссон. В сб.: *Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов* / Под ред. М.А. Мейерса, Л.Е. Мурра. *Металлургия*, М. (1984). С. 164.
- [21] Г.А. Малыгин. УФН **169**, 979 (1999).
- [22] Г.А. Малыгин. ФТТ **49**, 961 (2007).
- [23] Г.А. Малыгин. ФТТ **47**, 236 (2005).
- [24] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика*. Наука, М. (1976). 584 с.
- [25] А.П. Яловец. *Прикл. механика и техн. физика* **1**, 151 (1997).
- [26] А.А. Предподителев. В сб.: *Динамика дислокаций* / Под ред. В.И. Старцева, В.З. Бенгуса, В.И. Доценко. *Наук. думка*, Киев (1975). С. 178.
- [27] A. Hikata, R.A. Johnson, C. Elbaum. *Phys. Rev. B* **2**, 4856 (1970).
- [28] J.A. Gorman, D.S. Wood, T. Vreeland, Jr. *J. Appl. Phys.* **40**, 833 (1969).
- [29] J.R. Asay. *Int. J. Impact Eng.* **20**, 21 (1997).