

Научный семинар

Гомогенное зарождение дислокаций

Г.Э. Норман, А.В. Янилкин



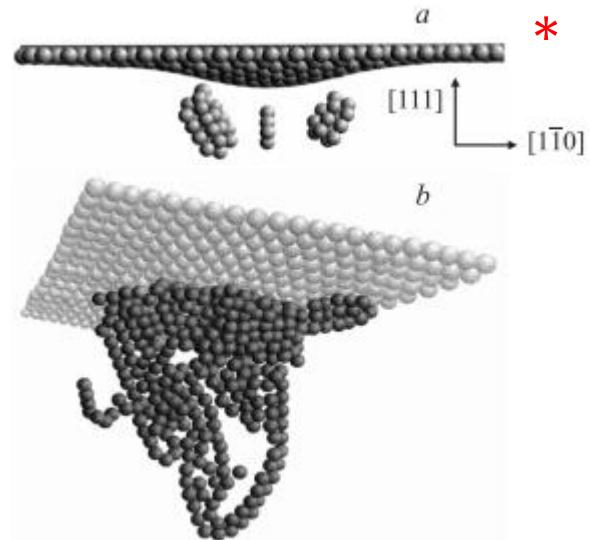
Физика твердого тела, 2011, том 53, вып. 8

Актуальность

Каким образом происходит зарождение дислокаций?

Существует несколько моделей зарождения:

1. Образование зародышей петель обусловлено локальным смещением одной части атомов относительно другой на вектор Бюргерса.
2. Зарождение петли – это наноскопический идеальный сдвиг, величина которого постепенно увеличивается в процессе зарождения, а размер зародыша остается постоянным.



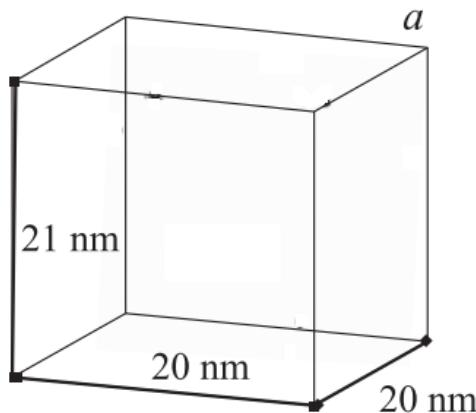
В настоящее время в литературе практически не исследована скорость гомогенного зарождения.

Большинство работ посвящено исследованию критического напряжения зарождения, которое является скорее оценочной величиной.

В данной работе исследовано гомогенное зарождение и определяется его кинетика.



Постановка задачи: начальная структура



ГУ: периодические

Материал: аллюминий

Два размера ячейки: 108000 и 504000 атомов

Использован потенциал погруженного атома

Используется пакет LAMMPS

NVT ансамбль

Этапы МД

1. Прикладываем сдвиговую деформацию
(схема показана)
2. Система приводится в равновесие при заданной температуре и деформации:
 $T = 300, 500$ и 700 К

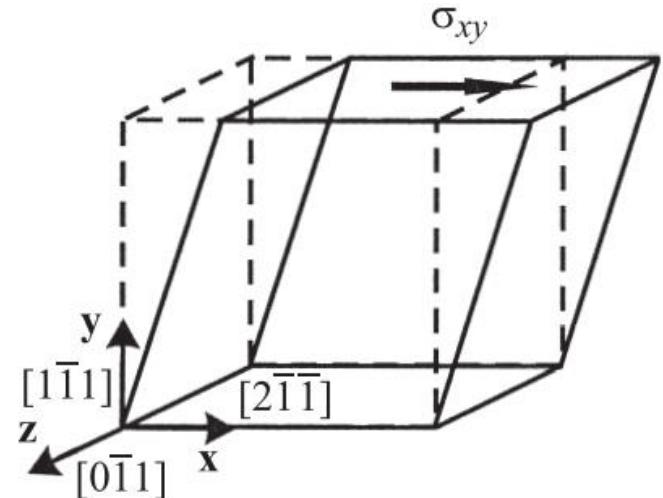


Рис. 1. Схема сдвигового деформирования кристалла.



Зарождение петли дислокаций. МД

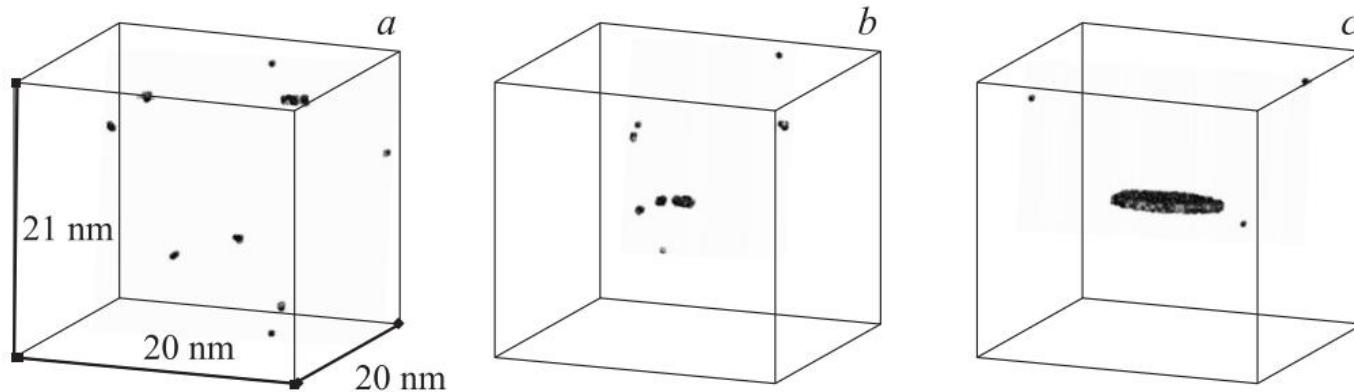


Рис. 2. Визуализация процесса зарождения петли дислокации. Показаны только атомы с дефектным локальным окружением. *a* — зарождение докритических зародышей сдвига ($t = 38 \text{ ps}$), *b* — появление критического зародыша ($t = 50 \text{ ps}$), *c* — рост петли дислокации и увеличение дефекта упаковки ($t = 51 \text{ ps}$). $T = 300 \text{ K}$, $\sigma_{xy} = 1.76 \text{ GPa}$.

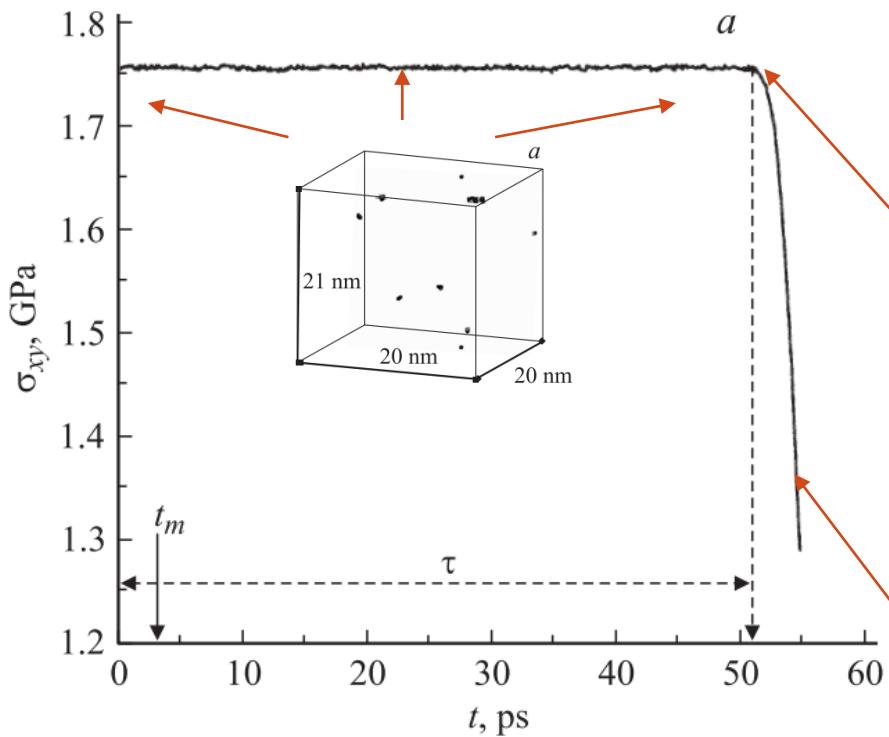
В плоскостях скольжения образуются и исчезают докритические зародыши дислокационных петель (а). Механизм образования носит термический характер и заключается в сдвиге атомов на вектор Бюргерса частичной дислокации $\mathbf{b} = \mathbf{a}/6[2-1-1]$, где $\mathbf{a} = 4,050 \text{ \AA}$ – параметр решетки.

Через 50 пс происходит возникновение закритического зародыша (б) с характерным размером 15 атомов, вытянутым в виде эллипса. После чего начинается рост петли (с).

Скорость движения дислокации (скорость увеличения петли) 28 \AA/p.s.

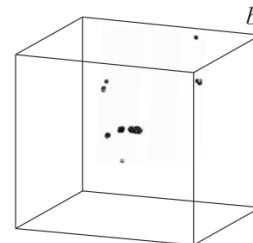


Анализ сдвиговых напряжений

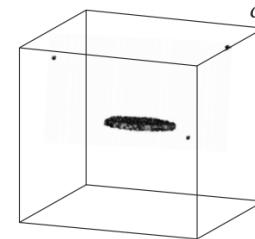


1. Слабое дрожание напряжений
(метастабильное состояние)

2. Образование зародыша



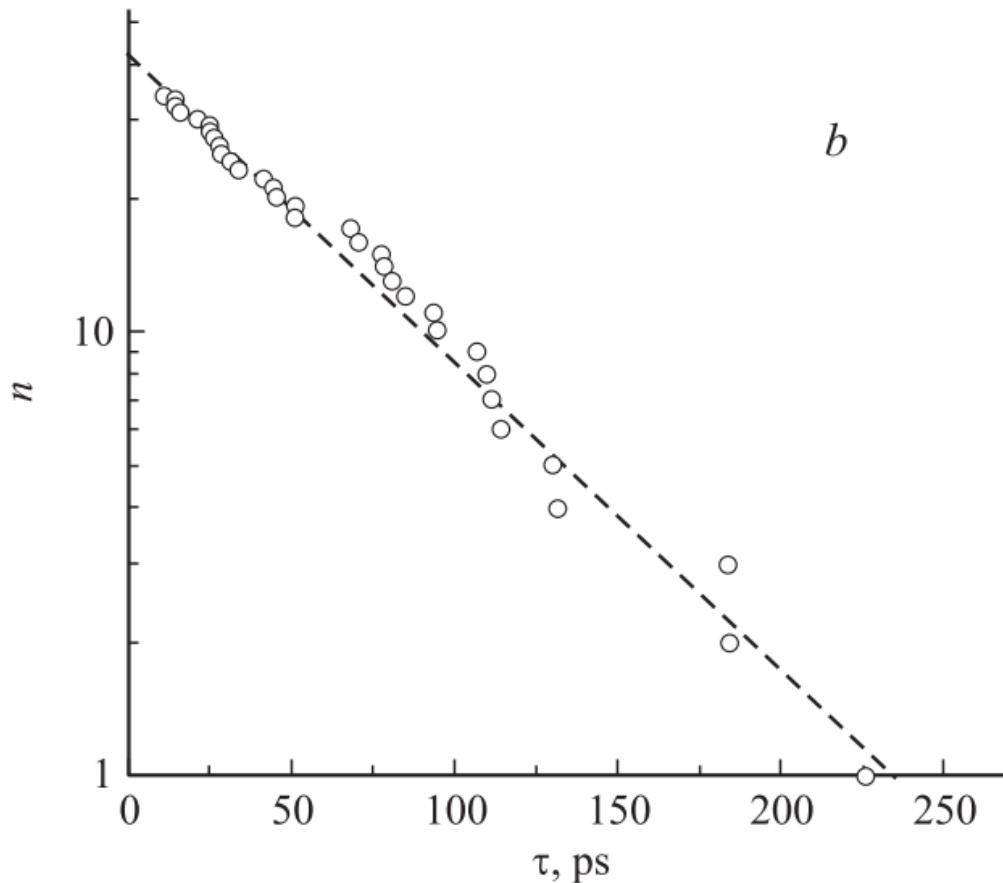
3. Быстрый рост зародыша,
который приводит к падению
напряжений



а — релаксация напряжений после фиксирования степени деформирования,
 t_m — время динамической памяти
 τ — время жизни метастабильного состояния



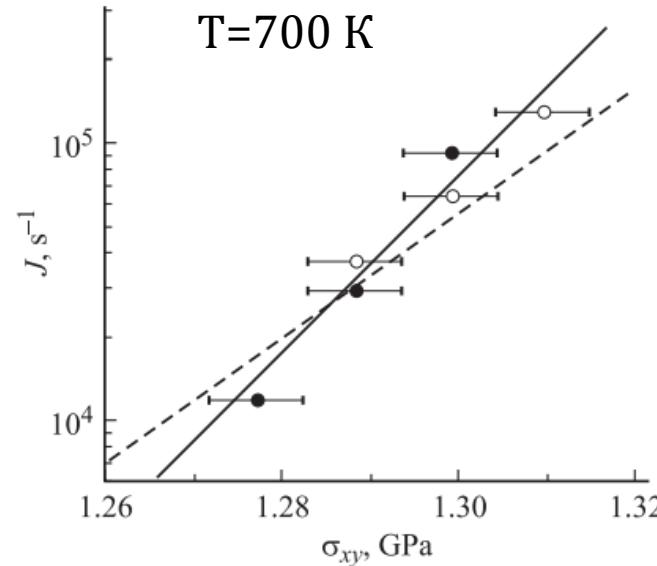
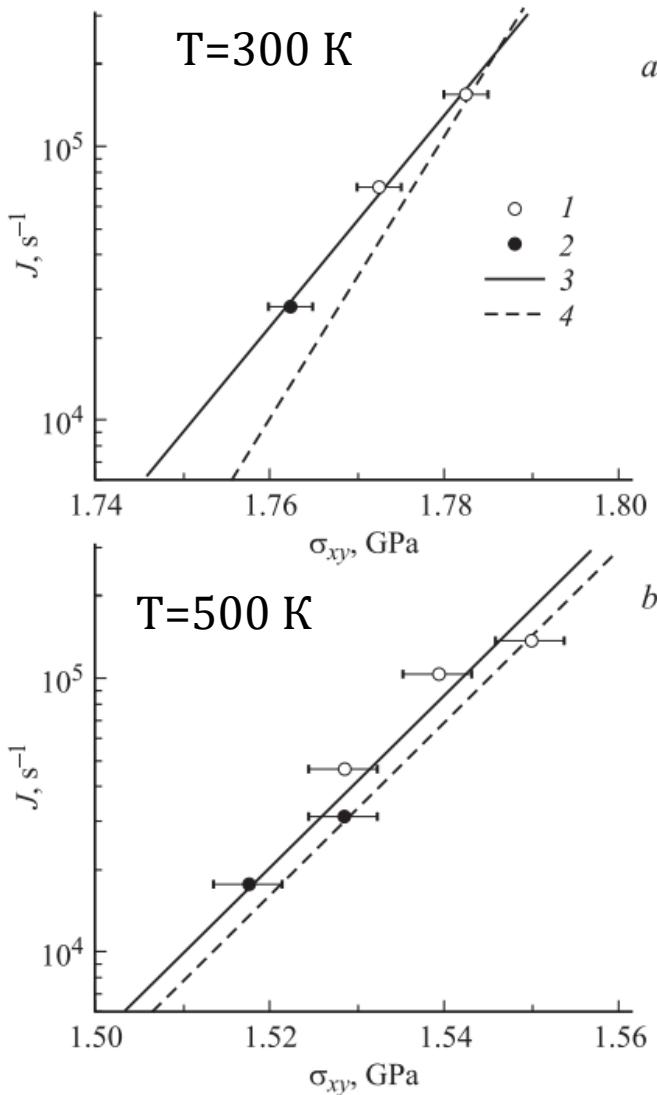
Определение скорости зарождения дислокаций



Число траекторий n , в которых не произошло зарождения к моменту времени τ – соответствует распределению времен зарождения. $T = 300$ К.



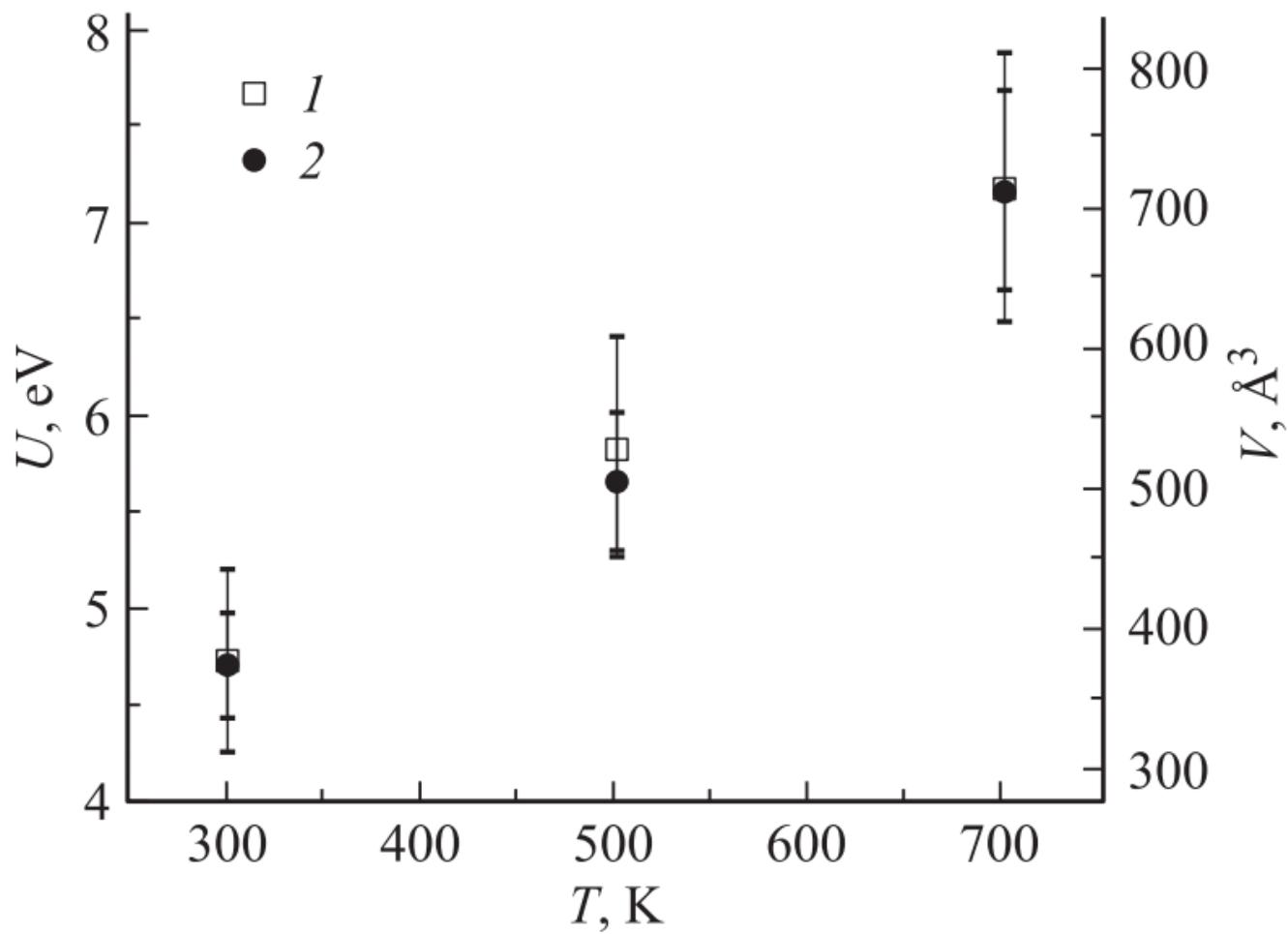
Зависимость скорости зарождения от сдвигового напряжения и температуры



J – частота зародышеобразования.
МД-расчеты проведены для размеров системы $N = 180\,000$ (1) и $504\,000$ атомов (2). 3 — аппроксимация по формуле (1) всех МД-точек, 4 — аппроксимация по формуле (1) для каждой температуры.



Энергия активации



Температурные зависимости активационной энергии и объема



Выводы

1. Исследовано гомогенное зарождение дислокаций методом молекулярной динамики в ГЦК кристалле (аллюминий);
2. Механизм зарождения заключается в локальном сдвиге группы атомов на вектор Бюргерса частичной дислокации вдоль плоскости скольжения;
3. Из анализа зависимости скорости зарождения дислокаций от сдвигового напряжения показано, что она может быть аппроксимирована в рамках формулы Аррениуса.

