

УДК 669.72

А. М. Власова^{1, 2*}, А. Ю. Никонов³

¹Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург

²Уральский Федеральный университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург

³Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, г. Томск

**Alisa-12005@yandex.ru*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ МАГНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

АННОТАЦИЯ

Проведено атомистическое моделирование деформации идеального кристалла магния вдоль кристаллографической оси $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, а также показано влияние его дефектности на процесс дегградации структуры. Зарождение дислокаций происходит от свободной поверхности кристалла, велико количество задействованных деформационных мод, среди которых базисное скольжение, $\{10\bar{1}3\}$ – двойникование. Выявлено образование сеток в габитусной плоскости. Предлагаются дислокационные реакции, описывающие эволюцию дислокаций в габитусной плоскости.

Ключевые слова: молекулярная динамика, магний, деформация, дислокация, структура.

A. M. Vlasova, A. Yu. Nikonov

MODELING OF THE DEFORMATION OF MAGNESIUM BY MOLECULAR DYNAMICS METHOD

ABSTRACT

Atomistic simulation of deformation of a perfect crystal of magnesium along the crystallographic axis $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ was carried out, and the influence of defects on the degradation process was shown. It is shown that dislocation nucleation occurs from the surface of the crystal. There are large number of active deformation modes, among which the basal glide and $\{10\bar{1}3\}$ – twinning. The formation of nets in habitus plane was revealed. Dislocation reactions describing the evolution of dislocations in habitus plane were offered.

Keywords: molecular dynamics, magnesium, deformation, dislocation, structure.

Первые экспериментальные работы по исследованию деформации монокристаллов магния принадлежат французским исследователям, которые методом просвечивающей электронной микроскопии наблюдали пирамидальное скольжение второго рода на $\langle 0001 \rangle$ монокристаллах [1].

Деформация монокристаллов с ориентировкой $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ рассматривалась в работе [2]. Первое наблюдение автоблокировки дислокаций в магний сообщалось в статье [3]. Атомистические исследования структуры ядра дислокаций с использованием потенциалов Леннарда – Джонса с 80-х гг. представлены во многих публикациях, среди которых [4 – 5]. Поведение магния при нагружении вдоль $\langle 0001 \rangle$ кристаллографической оси с применением N -частичного потенциала приведено в [6].

Целью настоящего исследования явилось молекулярно-динамическое моделирование образования дефектов различного типа в результате одноосного нагружения гексагонального магния вдоль кристаллографической оси $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, влияние дефектности исходного кристаллита на ход деформации, а также рассмотрение динамики образующихся дефектов в рассматриваемом процессе.

Моделирование проводилось с использованием вычислительного пакета *LAMMPS*, обработка данных расчетов выполнялась при помощи *Open Visualization Tools OVITO*, расчеты проводились на суперкомпьютере Института Математики и Механики УрО РАН «УРАН». В качестве моделируемой ячейки была взята идеальная совершенная гексагональная решетка магния размером $12,7 \times 33,1 \times 12,5$ нм в форме прямоугольного параллелепипеда, ребрам которого соответствовали кристаллографические направления $x = \langle \bar{1}100 \rangle$, $y = \langle 11\bar{2}0 \rangle$, $z = \langle 0001 \rangle$.

Деформация осуществлялась путем переопределения скоростей атомов, находящихся в приповерхностных слоях толщиной 11 межатомных расстояний. Вдоль оси Y лабораторной системы координат проекции скоростей атомов нагружаемых слоев были фиксированы. Модули скоростей соответствовали величине $V = 5$ м/с, а направления в различных слоях были ориентированы в сторону центра моделируемой системы. Таким образом, задавалось одноосное сжатие образца с постоянной скоростью 10 м/с. В направлении осей X и Z проекции скоростей атомов равнялись нулю.

N -частичный потенциал межчастичного взаимодействия, рассчитанный методом погруженного атома был выбран из работы [7]; для него характерно хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных для параметров решетки, отношения c/a , упругих модулей, энергии фазового перехода, энергии когезии.

Для расчета поведения системы взаимодействующих частиц, в качестве которых выступают отдельные атомы, в рамках метода

молекулярной динамики решалась система классических уравнений движения Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i, \quad (1)$$

где i — номер атома; m_i — масса i -го атома; \vec{r}_i — радиус-вектор i -го атома; \vec{F}_i — равнодействующая всех сил, действующих на i -й атом.

Состояние системы из N частиц в момент времени t однозначно определялось набором координат $\vec{r}_i(t)$ и скоростей $\vec{v}_i(t)$, где каждый вектор имеет 3 компоненты. Дифференциальные уравнения, определяющие эволюцию системы во времени для i -й частицы, записываются в виде:

$$\begin{cases} \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \\ \frac{d\vec{v}_i}{dt} = -\frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^n \frac{\partial u_{i,j}(r_{i,j})}{\partial r_{i,j}} \vec{r}_{i,j}. \end{cases} \quad (2)$$

Количественный учет двойниковых дислокаций среди общего их числа N в зависимости от шага моделирования показывает подавляющее преобладание двойникового среди других деформационных механизмов (рис.1).

Двойникующие дислокации лежат в плоскости габитуса, имеют краевую ориентацию, их вектор Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{18} \langle 04\bar{4}3 \rangle$.

Матрицы ориентационных соотношений между матрицей и двойником для плоскостей (3) и направлений (4), образующихся в результате $\{10\bar{1}3\}$ -двоичования можно записать следующим образом:

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ V_1 \\ W_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,438 & 0 & 1,685 \\ 0,281 & -1 & 0,842 \\ 0,479 & 0 & 0,439 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_2 \\ V_2 \\ W_2 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} H_1 \\ K_1 \\ L_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,438 & 0,281 & 0,479 \\ 0,00 & -1,00 & 0,00 \\ 1,685 & 0,842 & 0,439 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_2 \\ K_2 \\ L_2 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

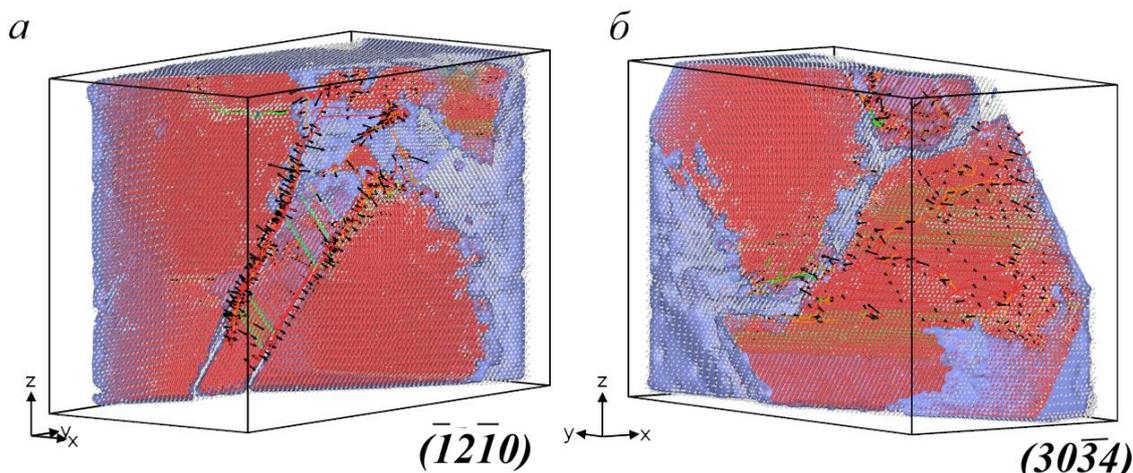


Рис. 1. Схема образовавшегося $\{10\bar{1}3\}$ -двойника

a – плоскость сечения моделируемой ячейки $(\bar{1}2\bar{1}0)$ – ряды плотнейшей упаковки сопряжены под углом 64 градуса друг к другу,

b – плоскость сечения моделируемой ячейки габитусная плоскость $\{30\bar{3}4\}$

Черные стрелки – направления векторов Бюргерса, красные атомы – атомы ГПУ, зеленые атомы – атомы ГЦК, синие атомы – свободная поверхность кристалла, красные линии – направления линий дислокаций, лежащих в габитусной плоскости

В процессе деформации двойниковые дислокации реагируют с частичными по реакции (5). Образованные таким образом дислокации с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{18}\langle 6\bar{2}43 \rangle$ в свою очередь реагируют с частичными по реакции (6)

$$\frac{1}{18}\langle 04\bar{4}3 \rangle + \frac{1}{3}\langle 1\bar{1}00 \rangle \rightarrow \frac{1}{18}\langle 6\bar{2}43 \rangle, \quad (5)$$

$$\frac{1}{18}\langle 6\bar{2}43 \rangle + \frac{1}{3}\langle 1\bar{1}00 \rangle \rightarrow \frac{1}{18}\langle 12\bar{8}43 \rangle. \quad (6)$$

Авторы благодарят РФФИ (грант 16-33-60027 мол. а. дк).

Расчеты проводились на суперкомпьютере ИММ УрО РАН «УРАН».

ЛИТЕРАТУРА

1. Stohr J. F., J. P. Poirier Etude en Microscopie electronique du glissement pyramidal $\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ dans le magnesium // Phil. Mag.-1972. № 25. P. 1313.
2. Ando S., Harada N., Tsushida M. Temperature dependence of deformation behavior in magnesium and magnesium alloys in single crystals // Key Engineering Materials. 2007. Vol. 345, 346. P. 101.

3. Первое наблюдение в чистом металле блокировки дислокаций без помощи внешнего напряжения / Б. А. Гринберг [и др.] // Кристаллография. 2012. Т. 57. № 4. С. 603–610.
4. The core structure of a $1/3$ $[1123]$ $\{1122\}$ screw dislocation in an h.c.p. model crystal / Y. Minonishy [et. al.] // Phil. Mag. A. 1981. Vol. 44, № 6. P. 1225–1237.
5. Liang, M. H. Bacon D. J. Computer simulation of dislocation cores in h.c.p. metals II. Core structure in unstressed crystals // Phil. Mag. A. 1986. Vol. 53, №2. P. 181–204.
6. Tang , X.-Z. Guo Y.-F., Wang S.X. Y.-S. Atomistic study of pyramidal slips in pure magnesium single crystal under nano-compression // Phil. Mag. 2015. Vol. 94, № 19. P. 2013–2025.
7. Crystal-melt interfacial free energies in hcp metals: A molecular dynamics study of Mg / D. Y. Sun [et. al.] // Phys. Rev. B. 2006. № 73. P. 116.