

# ЭМИССИЯ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ НАНОПОРАМИ В ГЦК-КРИСТАЛЛЕ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УДАРНЫХ ПОСЛЕКАСКАДНЫХ ВОЛН ПРИ СДВИГОВОЙ ДЕФОРМАЦИИ

*А. В. Маркидонов<sup>a\*</sup>, М. Д. Старостенков<sup>b</sup>, П. В. Захаров<sup>c</sup>,*

*Д. А. Лубяной<sup>d</sup>, В. Н. Липунов<sup>e</sup>*

*<sup>a</sup> Новокузнецкий институт (филиал) Кемеровского государственного университета  
654041, Новокузнецк, Кемеровская обл., Россия*

*<sup>b</sup> Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова  
656038, Барнаул, Алтайский край, Россия*

*<sup>c</sup> Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В. М. Шукшина  
659333, Бийск, Алтайский край, Россия*

*<sup>d</sup> Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т. Ф. Горбачева в г. Новокузнецке  
654027, Новокузнецк, Кемеровская обл., Россия*

*<sup>e</sup> Сибирский государственный индустриальный университет  
654041, Новокузнецк, Кемеровская обл., Россия*

Поступила в редакцию 8 мая 2019 г.,  
после переработки 29 мая 2019 г.  
Принята к публикации 3 июня 2019 г.

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния ударных послекаскадных волн, образующихся в твердом теле при облучении частицами с высокой энергией, на процесс гетерогенного образования дислокационных петель в моделируемом кристалле золота, содержащего нанопору сферической формы и подвергнутого сдвиговой деформации. Взаимодействие между атомами описывалось с помощью потенциала, рассчитанного в рамках метода погруженного атома. Ударные волны создавались путем присвоения граничным атомам расчетной ячейки скорости, превышающей скорость звука в моделируемом материале. Показано, что при сдвиговой деформации вблизи поверхности нанопоры формируются две области повышенного механического напряжения, которые являются источниками зарождающихся частичных дислокаций. Основным механизмом образования дислокаций является смещение группы атомов по направлению к внутренней поверхности поры, что не противоречит современным представлениям о гетерогенном образовании дислокаций. Показано, что при величине касательных напряжений, недостаточной для образования дислокаций, эмиссия петли может быть инициирована ударной послекаскадной волной, генерируемой в расчетной ячейке. При повышении температуры число зарождаемых дислокационных петель увеличивается и, кроме того, наблюдается образование дислокаций Ломер–Коттрелла, причиной образования которых являются дополнительные касательные напряжения, создаваемые волной разгрузки. При этом для формирования устойчивой дислокационной петли, у которой сила линейного натяжения уравнивается силой Пича–Келлера, обусловленной внешним напряжением, необходимо, чтобы фронт ударной волны при распространении по моделируемому кристаллу оказывал воздействие на области повышенного напряжения у поверхности поры.

DOI: 10.1134/S0044451019120046

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что радиационное воздействие на твердые тела сопровождается интенсивным образова-

нием дефектов. Системы первичных радиационных дефектов являются нестабильными и в ходе релаксации структуры образуют различные нанокластеры, в частности, нанопоры, присутствие которых в материале может оказывать значительное влияние на его функциональные характеристики. Одной

\* E-mail: markidonov\_artem@mail.ru

из актуальных задач радиационного материаловедения является прогнозирование поведения кристаллических тел в условиях интенсивного радиационного воздействия, в частности, очень важной является проблема предотвращения радиационного распухания материала. Пористость материала развивается при температурах, достаточных для активации диффузии точечных дефектов и их миграции к естественным стокам.

В условиях эксплуатации материал подвергается различным силовым, вибрационным и температурным нагрузкам. Кроме того, радиационное распухание способствует созданию неоднородных напряжений в конструкционных узлах, что может способствовать выходу их из строя [1–5]. Наличие внутренних сжимающих и сдвиговых напряжений, достигающих критических значений, способствует «залечиванию» поры по дислокационному механизму, реализуемому путем срабатывания источника Франка – Рида [6]. Эмиссия дислокационных петель в кристаллах, содержащих поры, наблюдается также и при ударном воздействии на твердое тело [7, 8].

Необходимо отметить, что существует еще одно явление, сопровождающее процесс облучения твердого тела высокоэнергетическими частицами, — образование ударных послекаскадных волн [9, 10]. Данные волны образуются из-за несоответствия времени термализации атомных колебаний, возникающих в процессе развития каскада атомных смещений в некоторой конечной области, и времени отвода от нее тепла. При резком расширении перегретой области генерируется ударная волна. Ранее авторами исследовалось влияние данных волн на процессы структурных перестроек нанопор сферической и цилиндрической форм [11–14], в том числе при наличии нормальных напряжений в кристалле. Отметим, что возможно влияние таких волн на миграцию границ зерен наклона в моноатомных металлах и интерметаллидах [15], а также они могут приводить к возбуждению солитоноподобных волн в различных кристаллах [16, 17].

Целью данной работы является исследование методом молекулярной динамики влияния ударной волны на процессы зарождения дислокационных петель на порах при наличии касательных напряжений.

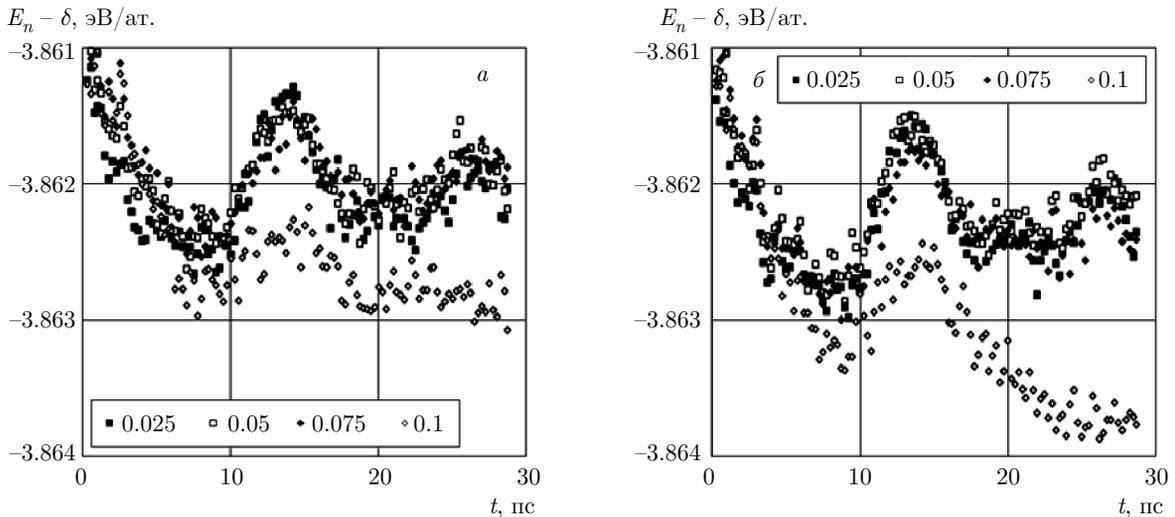
## 2. ОПИСАНИЕ МЕТОДИКИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Исследование проводилось с помощью метода молекулярной динамики, суть которого заключается в описании поведения системы частиц с помощью

обыкновенных дифференциальных уравнений Ньютона. Выбор метода компьютерного моделирования обусловлен затрудненностью прямых наблюдений таких быстротекущих процессов, как прохождение ударной волны по кристаллической структуре и перестройка групп дефектов под ее воздействием. Для интегрирования заданной системы уравнений использовался скоростной алгоритм Верле. При этом временной шаг равнялся 5 фс. Межчастичное взаимодействие описывалось с использованием потенциала, рассчитанного в рамках метода погруженного атома [18]. Подобный класс потенциалов позволяет исследовать широкий спектр задач [19–24].

Моделирование проводилось на расчетной ячейке, имитирующей кристалл золота и состоящей из 32000 частиц. В системе координат, сопоставленной с расчетной ячейкой, оси  $x$ ,  $y$  и  $z$  соответствовали кристаллографическим направлениям  $[1\bar{1}0]$ ,  $[11\bar{2}]$  и  $[111]$ . Для создания поры в расчетной ячейке предварительно выделялась сферическая область, центр которой совмещался с центральным узлом моделируемой кристаллической решетки, и затем удалялись все атомы, принадлежащие ей. Напряженное состояние в расчетной ячейке с отличной от нуля дивергентной компонентой тензора напряжений  $\tau$  достигалось путем сдвигового деформирования. Геометрия расчетной ячейки при этом поддерживалась с помощью комбинации жестких и периодических граничных условий. После конструирования следовала процедура релаксации структуры, и полученная таким образом система частиц использовалась в последующем исследовании.

Для создания волны выделялся единичный слой атомов на одной из границ расчетной ячейки, и выбранным частицам присваивались равные по величине скорости вдоль единого кристаллографического направления. В случае присвоения атомам скорости, превышающей скорость звука в рассматриваемом материале, распространяющиеся по эстафетному принципу атомные смещения представляют собой бегущую волну, ширина фронта которой составляет несколько межатомных расстояний, а амплитуда колебаний значительно превышает по величине тепловые колебания атомов, что характерно для волн, генерируемых каскадной областью [25]. Подобный способ создания ударной послекаскадной волны приводит к повышению температуры расчетной ячейки; для поддержания постоянной температуры и снятия излишков теплового фона применялся термостат Берендсена. Также необходимо оговорить, что выбранный потенциал межчастичного взаимодействия верно описывает пороговую энергию

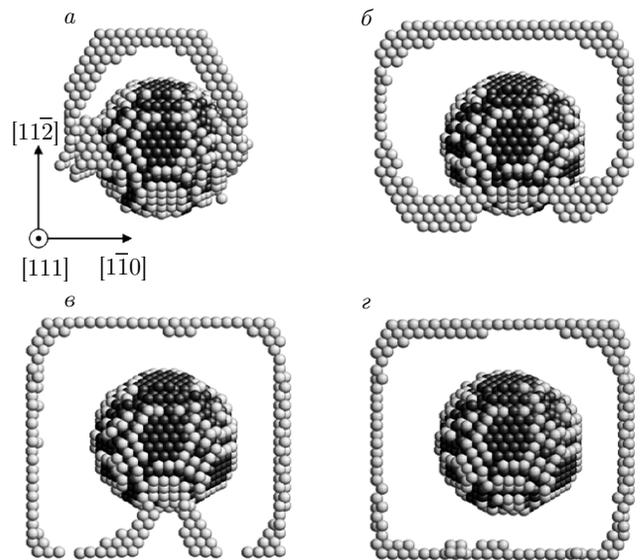


**Рис. 1.** Зависимости изменения потенциальной энергии моделируемой системы (представлены сопоставленные значения) от времени при различных углах  $\gamma$  [рад]. Температура расчетной ячейки 300 К. Представлены результаты для сдвиговых деформаций  $\epsilon_{xz}$  (а) и  $\epsilon_{yz}$  (б)

смещения, поэтому описанный выше способ создания волны в кристалле исключает некорректность моделирования. Расчеты выполнялись с использованием пакета XMD [26].

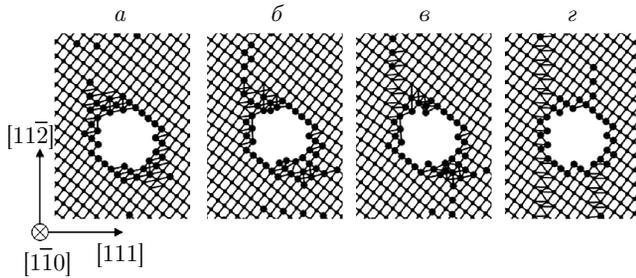
### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На первом этапе исследования было определено изменение потенциальной энергии расчетной ячейки в процессе релаксации при варьировании угла сдвига  $\gamma$  по различным направлениям. Среди множества возможных способов реализации сдвиговой деформации были выбраны два: сдвиги параллельно плоскости (111), вдоль направления  $[1\bar{1}0]$  ( $\epsilon_{xz}$ ) и вдоль направления  $[11\bar{2}]$  ( $\epsilon_{yz}$ ). Данный выбор обусловлен тем, что для ГЦК-решетки плоскость (111) обладает наибольшей плотностью упаковки атомов, и, следовательно, элементарные смещения в данной плоскости требуют наименьшей силы. Очевидно, что увеличение угла сдвига приводит к росту потенциальной энергии моделируемой системы. Для того чтобы проанализировать ее изменение в ходе временной эволюции системы и сопоставить графики энергии, они были приведены к единому виду путем вычитания из их значений  $E_n$  разности  $\delta$  энергий ячейки со сдвигом и без на начальном шаге компьютерного эксперимента. Результаты вычислений представлены на рис. 1.



**Рис. 2.** Визуализация процесса роста дислокационной петли при сдвиговой деформации  $\epsilon_{yz}$  ( $\gamma = 0.1$  рад). Температура расчетной ячейки 300 К. Представлены результаты через 1.25 пс (а), 2.5 пс (б), 3.75 пс (в), 5 пс (г). Частицы, выделенные темным цветом, образуют поверхность поры

Как следует из рис. 1, при  $\gamma = 0.1$  рад наблюдается уменьшение потенциальной энергии системы и зависимость начинает значительно отличаться от остальных, приведенных на рисунке, что свидетельствует о структурных изменениях, произошедших в расчетной ячейке. Визуальное исследование показало, что в данном случае наблюдается гетероген-



**Рис. 3.** Визуализация плоскости  $(1\bar{1}0)$  расчетной ячейки при сдвиговой деформации  $\varepsilon_{yz}$  ( $\gamma = 0.1$  рад) через 1.25 пс (а), 1.75 пс (б), 2.5 пс (в), 7.5 пс (г). Для наглядности выделены частицы, энергия связи которых отлична от энергий большинства частиц ячейки

ное зарождение дислокационной петли на свободной поверхности поры с последующим ее развитием. Рост петли продолжался до границ расчетной ячейки (рис. 2). Визуализация петли на приведенном рисунке осуществлялась путем исключения из отображаемых частиц тех атомов, энергия связи которых соответствует идеальной кристаллической решетке. Отметим, что представлены результаты моделирования на расчетной ячейке, содержащей нанопору из 1080 вакансий. Исследования проводились с порами различного размера, но на рис. 2 приведены наиболее наглядные результаты.

Зарождение дислокационной петли реализуется по следующему механизму. Под воздействием касательных напряжений у поверхности поры формируются области напряжений, в которых наблюдается локальное искажение кристаллической решетки (рис. 3а). Далее в этих областях осуществляется смещение группы атомов (в плоскости плотнейшей упаковки) по направлению к поре с зарождением частичной дислокации и формированием дефекта упаковки (рис. 3б), который продолжает расти и расширяться, пока не достигнет границы расчетной ячейки (рис. 3в). Вторая область напряжений у поверхности поры также является источником формирования частичной дислокации за счет сдвига (рис. 3г). Для построения изображений, представленных на рис. 3, использовался визуализатор атомных рядов, позволяющий достаточно просто продемонстрировать нарушение симметрии в кристаллической структуре. Данный визуализатор представляет собой линии, соединяющие частицы, расположенные на задаваемом исследователем расстоянии друг от друга. При смещении группы атомов на расстоянии меньше равновесного визуализатор прорисовывает дополнительные линии.

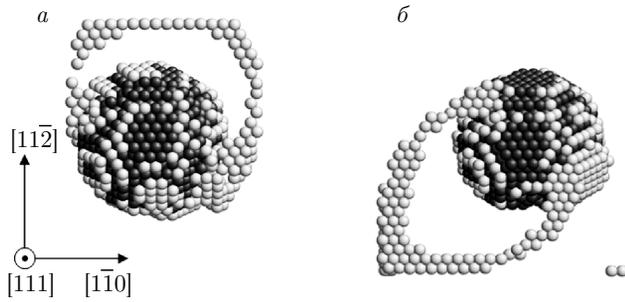
Отметим, что в проводимом молекулярно-динамическом моделировании, как правило, петли образовывались парами, но на рис. 2 вторая петля не показана, для того чтобы не загромождать изображение.

Описанный выше механизм зарождения дислокационной петли на поверхности поры, предполагающий кооперативный сдвиг группы атомов, согласуется с механизмом, описанным в работе [27]. Авторы данной работы делают вывод, что для ГЦК-металлов испускание порами дислокаций путем наноскопического идеального сдвига является энергетически выгодным процессом.

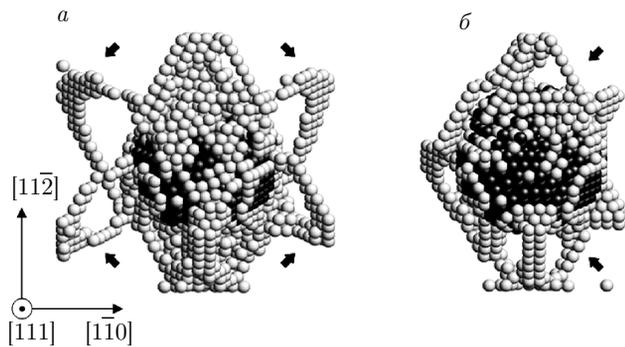
В рамках построенной модели для зарождения дислокационных петель при температуре расчетной ячейки 300 К необходимо создаваемое касательное напряжение величиной  $\tau \approx 2.25$  ГПа, достигаемое за счет сдвиговой деформации. Очевидно, что при недостаточной деформации зарождение петли станет возможным, если в расчетной ячейке создать дополнительные источники касательных напряжений. Ранее в работе [28] было показано, что при генерации в кристалле ударной волны и формировании после этого волны разгрузки касательные напряжения достигают значений, достаточных для смещения краевой дислокации. Поэтому было проведено исследование, как влияют создаваемые в расчетной ячейке ударные волны на процесс зарождения дислокационных петель при наличии поры.

Проведенное исследование показало, что процесс образования петли зависит от расположения источника генерируемой волны относительно поры. Так, например, в случае распространения волны вдоль плотноупакованного направления типа  $\langle 110 \rangle$ , как правило, вне зависимости от направления сдвига, при встрече фронта волны с порой от нее отщепляется группа вакансий, которые в дальнейшем перестраиваются в тетраэдр дефектов упаковки, чему способствует используемый в построенной модели металл (золото), обладающий низкой энергией образования дефекта упаковки. Подобного рода дефекты исследовались в работе [29]. В случае, если фронт волны распространяется вдоль направления типа  $\langle 112 \rangle$ , затухание волны происходит быстрее и отщепление вакансий не происходит. При этом в случае сдвиговой деформации  $\varepsilon_{yz}$  наблюдался процесс зарождения петли, но после угасания возмущений, вызванных сгенерированной волной, петля стягивалась обратно к поре из-за недостаточной величины касательных напряжений.

При варьировании направления распространения волны в расчетной ячейке было установлено,



**Рис. 4.** Визуализация частичных дислокационных петель, образующихся под воздействием ударных волн, при сдвиговых деформациях  $\varepsilon_{xz}$  (а) и  $\varepsilon_{yz}$  (б) ( $\gamma = 0.06$  рад). Температура расчетной ячейки 300 К



**Рис. 5.** Визуализация частичных дислокационных петель (а), образование которых осуществляется после прохождения ударной волны, и дислокаций Ломер–Коттрелла (б), сформировавшихся в процессе релаксации структуры. Температура расчетной ячейки 600 К. Сдвиговая деформация  $\varepsilon_{yz}$  ( $\gamma = 0.06$  рад)

что эмиссия дислокационной петли осуществляется в том случае, если фронт волны пересекает области напряжений у поверхности поры (см. рис. 3а), в которых осуществляется в дальнейшем сдвиг группы атомов. Для того чтобы максимально сконцентрировать воздействие волны на данные области, уменьшалось число граничных атомов, которым присваивалась скорость, и генерировались две волны, бегущие навстречу друг другу от противоположных границ расчетной ячейки. При таком воздействии ударных волн на пору наблюдалось образование частичных дислокационных петель, оставшихся стабильными после угасания волны (рис. 4), т. е. в данном случае сила линейного натяжения петли уравновешивается силой Пича–Келлера, обусловленной внешним напряжением.

При повышении температуры расчетной ячейки до 600 К под воздействием ударной волны наблюдается одновременное зарождение четырех частичных

дислокационных петель, располагающихся симметрично в различных плоскостях (рис. 5а). В дальнейшем петли стягиваются, а на месте двух областей напряжений у поверхности поры формируются дислокации Ломер–Коттрелла (рис. 5б). Как показано в работе [30], подобные дислокации стабилизируют пору.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное исследование показало, что при сдвиговой деформации у поверхности поры образуются две области повышенного напряжения, которые являются источниками формирования дислокационных петель. Подобная перестройка дефектной структуры моделируемой системы является энергетически выгодной. В качестве механизма дислокационной эмиссии рассматривается кооперативный сдвиг группы атомов, что соответствует литературным источникам. При недостаточной величине касательных напряжений эмиссию дислокационных петель и дислокаций Ломер–Коттрелла может инициировать ударная послекаскадная волна. Одним из необходимых условий образования устойчивой дислокационной петли является воздействие фронта распространяющейся волны на области повышенного напряжения у поверхности поры.

Результаты проведенного исследования могут быть использованы в радиационном материаловедении, нанотехнологии, при ультразвуковой обработке материалов.

**Финансирование.** Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Администрации Алтайского края в рамках научного проекта № 18-42-220002 p\_a.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. V. S. Neustroev and F. A. Garner, Fusion Materials: Semiannual Progress Report for Period Ending December 31, **43**, 109 (2007).
2. A. I. Melker, Mat. Phys. Mech. **9**, 135 (2010).
3. A. S. Kalchenko, V. V. Bryk, N. P. Lazarev et al., J. Nucl. Mater. **399**, 114 (2010).
4. S. L. Dudarev, D. R. Mason, E. Tarleton et al., Nucl. Fusion **58**, 126002 (2018).
5. B. Z. Margolin, A. I. Murashova, and V. S. Neustroev, Strength Mater. **44**, 227 (2012).

6. А. И. Петров, М. В. Разуваева, А. Б. Синани и др., ЖТФ **68**, 125 (1998).
7. L. P. Davila, P. Erhart, E. M. Bringa et al., Appl. Phys. Lett. **86**, 161902(3) (2005).
8. T. Hatano, Phys. Rev. Lett. **93**, 085501(4) (2004).
9. В. В. Овчинников, УФН **178**, 991 (2008).
10. A. F. Calder, D. J. Bacon, A. V. Barashev et al., Phil. Mag. **90**, 863 (2010).
11. A. V. Markidonov, M. D. Starostenkov, and P. Y. Tabakov, Mat. Phys. Mech. **18**, 148 (2013).
12. A. V. Markidonov, Appl. Mech. Mat. **682**, 25 (2014).
13. А. В. Маркидонов, М. Д. Старостенков, А. А. Сосков и др., ФТТ **57**, 1521 (2015).
14. А. В. Маркидонов, М. Д. Старостенков, Г. М. Полетаев, Изв. РАН, сер. физ. **79**, 1233 (2015).
15. Г. М. Полетаев, И. В. Зоря, М. Д. Старостенков и др., ЖЭТФ **155**, 96 (2019).
16. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, С. В. Дмитриев и др., ЖЭТФ **148**, 252 (2015).
17. П. В. Захаров, С. В. Дмитриев, М. Д. Старостенков и др., ЖЭТФ **152**, 1073 (2017).
18. R. A. Johnson, Phys. Rev. B **39**, 12554 (1989).
19. J. Fikar, R. Schäublin, D. R. Mason et al., Nucl. Mater. Energy **16**, 60 (2018).
20. C. Varvenne, O. Mackain, and E. Clouet, Acta Mater. **78**, 65 (2014).
21. M.-C. Marinica, L. Ventelon, M. R. Gilbert et al., J. Phys.: Condens. Matter **25**, 395502 (2013).
22. И. С. Гордеев, С. В. Стариков, ЖЭТФ **155**, 878 (2019).
23. B. J. Demaske, V. V. Zhakhovsky, C. T. White et al., AIP Conf. Proc. **1426**, 1211 (2012).
24. B. Onat and S. Durukanoglu, J. Phys.: Condens. Matter **26**, 035404 (2014).
25. В. П. Жуков, А. А. Болдин, Атомная энергия **63**, 375 (1987).
26. XMD — Molecular Dynamics for Metals and Ceramics, <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.
27. С. В. Бобылев, Н. Ф. Морозов, И. А. Овидько, ФТТ **49**, 1044 (2007).
28. М. Д. Старостенков, А. А. Потекаев, А. В. Маркидонов и др., Изв. ВУЗов, физика **59**, 105 (2016).
29. Г. М. Полетаев, М. Д. Старостенков, Письма в ЖТФ **35**, 3 (2009).
30. J. Marian, J. Кнар, and M. Ortiz, Acta Mater. **53**, 2893 (2005).