

PACS: 07.05.Tr, 61.72.Lk, 62.20.fq, 82.20.Wt

UDC: 53.08; 538.9; 548.4

Комп'ютерне моделювання впливу гідростатичного тиску на ковзання гвинтових $\langle a \rangle$ дислокацій в Mg

А. Остаповець¹, О. Ватажук²

1 CEITEC-IPM, Інститут фізики матеріалів Академії наук Чеської Республіки, Жижкова, 22, Брно, 61600, Чеська Республіка

*2 Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України, пр. Науки 47, Харків, 61103, Україна
vatazhuk@ilt.kharkov.ua*

ORCID: 0000-0002-3781-4716, 0000-0003-0431-9660

DOI:10.26565/2222-5617-2020-33-04

Атомістичне моделювання впливу гідростатичного тиску на критичне дозволене напруження зсуву проводили для ковзання гвинтової $\langle a \rangle$ дислокації в магнії. Основна увага приділялась розгляду еволюції ядра дислокації під впливом гідростатичного тиску, що може змінити пластичну поведінку матеріалу і призвести до активації різних систем ковзання. Передбачається, що процеси в дислокаційному ядрі можуть призвести до відхилення від закону Шміда для дислокаційного ковзання, подібних до ситуації в об'ємноцентрованих кубічних металах, та полегшення активації небазисних систем ковзання. Розрахунки були проведені з використанням міжатомного потенціалу магнію – модифікованого методу зануреного атома. Для використаного потенціалу було виявлено два типи дислокаційних ядер в залежності від початкового положення центру пружного поля: дисоційоване в базисній площині (B) і розширене в призматичній площині (C2). Ядро B відповідає за ковзання в базисній площині, C2 – за призматичне ковзання дислокації. Призматичне ковзання $\langle a \rangle$ дислокації є більш складним у порівнянні з базисним випадком. Застосування тиску може змінити критичне дозволене напруження зсуву для базисного та призматичного ковзання. Показані результати комп'ютерного моделювання базисного та призматичного дислокаційного ковзання в магнії під гідростатичним тиском. Критичне дозволене напруження зсуву при 0 К та нульовому тиску становить близько 55 МПа та 105 МПа для базисного та призматичного ковзання, відповідно. Залежність критичного напруження для базисного ковзання залишається практично незмінною. Лише для значень тиску вищих за 1000 МПа спостерігається незначне зниження. Призматичне ковзання $\langle a \rangle$ дислокації демонструє відмінну поведінку, в порівнянні з базисним ковзанням. Спостерігається підвищення критичного дозволеного напруження зсуву для ядра C2 з підвищенням прикладеного тиску. Ефект залежить від структури дислокаційного ядра. Це може бути пов'язано із залежністю від тиску перехідної дилатації ядра дислокації. Оцінка залежності критичного напруження від тиску для базисного і призматичного ковзання, виявляє ознаки якісної згоди з результатами атомістичного моделювання.

Ключові слова: дефекти, метали та сплави, моделювання, дислокації, ГЦП, гідростатичний тиск.

Computer simulations of hydrostatic pressure influence on screw $\langle a \rangle$ dislocation slip in Mg

А. Ostapovets¹, O. Vatazhuk²

1 CEITEC-IPM, Institute of Physics of Materials, Czech Academy of Sciences, Žižkova 22, Brno, Czech Republic

2 B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering NAS of Ukraine, 47 Nauki Ave., 61103 Kharkov, Ukraine

Atomistic modeling of hydrostatic pressure influence on critical resolved shear stress was performed for glide of screw $\langle a \rangle$ dislocation in magnesium. It was found that application of pressure can change the resolved critical stress for basal and prismatic slip. The effect is dependent on dislocation core structure. It can be connected to the pressure dependence transient dilatation of the dislocation core.

Keywords: defects, metals and alloys, simulation and modeling, dislocations, hcp, hydrostatic pressure.

Компьютерное моделирование влияния гидростатического давления на скольжение винтовых $\langle a \rangle$ дислокаций в Mg

А. Остаповец¹, Е. Ватажук²

1 CEITEC-IPM, Институт физики материалов Академии наук Чешской Республики, Жижкова, 22, Брно, 61600, Чешская Республика

2 Физико-технический институт низких температур им. Б. Веркина НАН Украины, пр-т Науки 47, 61103 Харьков, Украина

Атомистическое моделирование влияния гидростатического давления на критическое разрешенное напряжение сдвига было выполнено для скольжения винтовой $\langle a \rangle$ дислокации в магнии. Было обнаружено, что приложение давления может изменить разрешенное критическое напряжение для базисного и призматического скольжения. Эффект зависит от структуры ядра дислокации. Это может быть связано с зависимостью от давления переходной дилатации ядра дислокации.

Ключевые слова: дефекты, металлы и сплавы, моделирование, дислокации, ГПУ, гидростатическое давление.

Вступ

Магній та його сплави є перспективними легкими матеріалами [1]. Однак ці сплави погано деформуються завдяки своїй гексагональній щільнопакованій (ГЦП) структурі. Їх пластична деформація характеризується наявністю різноманітних режимів ковзання та двійникування [2, 3]. На відміну від кубічних матеріалів, де основні системи ковзання симетрично еквівалентні і можуть приймати будь-які деформації, критичні дозволені напруження зсуву (critical resolved shear stress – CRSS) суттєво змінюються для різних систем ковзання в ГЦП. Найлегші системи ковзання в магнії знаходяться в базисній площині. Однак лише базисне ковзання не здатне забезпечити деформацію вздовж c -напрямку решітки ГЦП. Це призводить до обов'язкової активації призматичних та пірамідальних систем ковзання, а також деформаційного двійникування. На жаль, як призматичну, так і пірамідальну системи ковзання важко активувати при кімнатній температурі [3-5]. Це призводить до того, що магній погано піддається формуванню та штампуванню і має обмежену придатність до використання, як конструкційного матеріалу. Одним із способів поліпшення деформаційних характеристик Mg є зменшення розміру зерна [6, 7]. Процедури зменшення зерна часто базуються на інтенсивній пластичній деформації, такій як рівноканальне кутове пресування (equal channel angular pressing – ECAP) [8], екструзія або кручення під високим тиском (high pressure torsion – HPT) [9]. Застосування гідростатичного тиску відіграє вирішальну роль у такій обробці магнієвих сплавів. Наприклад, відомо, що ECAP Mg потребує застосування протитиску [10-13]. Загалом, застосування гідростатичного тиску може змінити пластичну поведінку матеріалу і може призвести до активації різних систем ковзання. Повідомлялося, що застосування гідростатичного тиску до магнієвих сплавів може полегшити активацію небазисних систем ковзання [11, 12].

Відомо, що критичне дозволене напруження зсуву (CRSS) для дислокаційного ковзання може залежати від структури дислокаційного ядра. Наприклад, неплоска дисоціація дислокацій ковзання [14] може призвести до нешмідовської поведінки об'ємноцентрованих кубічних (ОЦК) матеріалів. Однак часто прийнято вважати, що помірний гідростатичний тиск незначно впливає на дислокаційне ковзання [15, 16]. Вплив нешмідовських компонентів напруження, на дислокаційне ковзання менш вивчений для матеріалів зі структурою ГЦП. Однак, значне відхилення від закону Шміда спостерігалось в монокристалах Zn [17], де коливання

прикладеного нормального напруження призвело до 30-відсоткового падіння критичного напруження зсуву. Нещодавно нешмідовська поведінка $\langle a \rangle$ дислокацій була продемонстрована в комп'ютерному моделюванні магнію [18, 19]. Ефект пояснювався зміною ширини ядра дислокації під впливом нешмідовських компонентів прикладеного напруження. Можна припустити, що гідростатичний тиск може деформувати дислокаційне ядро і впливає на дислокаційне ковзання. Атомістичне моделювання алюмінію з гранецентрованою кубічною структурою (ГЦК) дозволило зробити висновок, що залежне від тиску ковзання в металах є результатом взаємодії перехідної дилатації активації рухомих дислокацій із зовнішнім тиском [20]. Наскільки нам відомо, ефект не обговорювався в літературі для випадку ГЦП магнію.

Ця робота повідомляє результати комп'ютерного моделювання базисного та призматичного дислокаційного ковзання в магнії під гідростатичним тиском.

2. Моделювання

2.1. Міжатомний потенціал

Розрахунки були проведені з використанням міжатомного потенціалу для магнію – модифікованого методу зануреного атома (Modified Embedded Atom Method – MEAM) від Kim та співавт. [21]. Моделювання проводили за допомогою LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [22], а для візуалізації використовували OVITO (Open Visualization Tool) [23]. Раніше було показано, що цей потенціал демонструє помітну згоду передбачених дислокаційних властивостей із прогнозами розрахунків ab-initio [24, 25]. Варто зазначити, що, наприклад, популярний Liu та співавт. потенціал EAM [26] передбачає для гвинтової $\langle a \rangle$ дислокації лише компактне ядро на відміну від прогнозів ab-initio [24, 27, 28]. Деякі вдосконалені версії Kim та співавт. MEAM потенціалу були запропоновані Wu та співавт. [25] та Barrett та співавт. [29]. Однак ми використовуємо оригінальну версію Kim та співавт. потенціалу у цій роботі. Wu потенціал демонструє відсутність помітних відмінностей від Kim потенціалу у прогнозуванні дислокаційних властивостей [26]. Налаштування параметрів потенціалу, запропоноване Barrett та співавт. [29] було спрямоване насамперед на покращення прогнозування енергій двійникових границь. Отже, можна зробити висновок, що всі згадані потенціали MEAM мають незначні відмінності в прогнозуванні властивостей дислокацій.

2.1. Налаштування моделювання

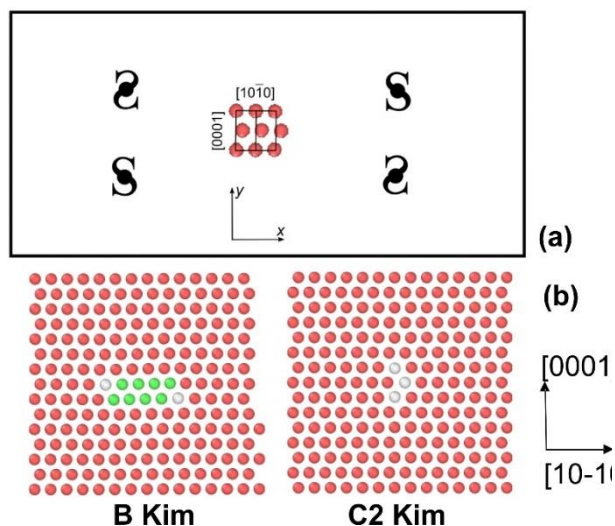


Рис. 1. (а) Схема блоку моделювання. (б) Два типи дислокаційних ядер: V – дисоційовані в базисній площині; C2 – ядра, розширені в призматичній площині. Атоми забарвлені відповідно до аналізу найближчих сусідів: рожевий – ГЦП, зелений – ГЦК, білий – ін.

Блок моделювання був орієнтований з віссю x паралельно напрямку $[1\bar{1}00]$, віссю y паралельно напрямку $[000\bar{1}]$ і віссю z вздовж напрямку $[11\bar{2}0]$. Блок містив 4 гвинтові $\langle a \rangle$ дислокації і був періодичним у всіх напрямках (рис. 1а). Розмір блоку становив $400\sqrt{3}a \times 150c \times 4a$, де a – параметр решітки.

Міграцію дислокацій вивчали шляхом деформації зсуву, прикладеної до блоку малими кроками ($\Delta\epsilon = 0,00001$), шляхом зміни геометрії блоку з одночасним масштабуванням атомних координат. Мінімізацію енергії проводили після кожного кроку деформації.

Компоненти напруження ковзання – це σ_{zy} для базисного ковзання та σ_{zx} для призматичного ковзання.

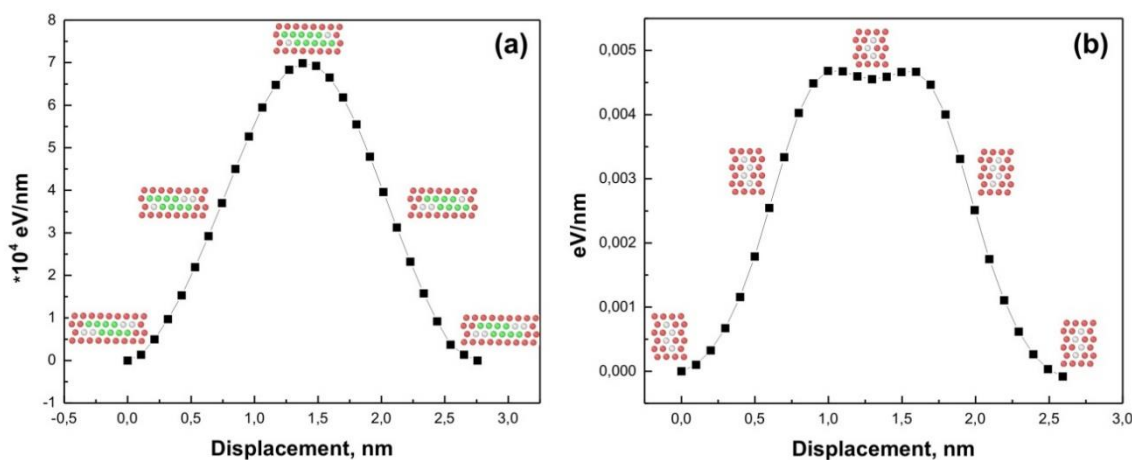


Рис. 2. Бар'єри Пайерлса для базисного ковзання (а) та призматичного ковзання (б) гвинтової $\langle a \rangle$ дислокації. Бар'єри були розраховані в роботі [28] методом підштовхуваних пружних смуг з використанням Sun EAM. Також показано еволюцію основної структури по шляху.

Постійний гідростатичний тиск приклали перед застосуванням напруження зсуву. Тиск застосовували за допомогою анізотропної зміни розміру блоку, щоб отримати $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = p/3$. Критично дозволене напруження зсуву вимірювали при різних рівнях прикладеного тиску.

2.2. Дислокаційні ядра

Гвинтові дислокації з дислокаційною лінією вздовж осі z були вставлені в блок шляхом застосування анізотропного пружного поля, отриманого з аналітичного рішення [30]. Ми обмежили наш розгляд ковзанням гвинтових $\langle a \rangle$ дислокацій (з вектором Бюргера $\mathbf{b} = 1/3[11\bar{2}0]$) на базисній та призматичній площинах. Такий вибір зроблено тому, що гвинтова дислокація визначає пластичну поведінку матеріалу. Відомо, що напруження Пайерлса для крайових дислокацій нижчі, ніж для гвинтових [25, 28, 29]. Отже, саме гвинтові частини дислокаційної петлі уповільнюють розвиток деформації. У випадку потенціалу Kim MEAM було виявлено два типи дислокаційних ядер в залежності від початкового положення центру пружного поля (рис. 1б). Дотримуючись значень введених в [28], позначимо їх як V і C2. Ядро V дисоціюється в базисній площині, і дислокація ковзає вздовж базисної площини в цьому вигляді. Ядро C2 є розширене вздовж призматичної площини і відповідає за призматичне ковзання дислокації. Раніше було виявлено [28], що ядро C2 метастабільне з потенціалом Sun EAM [31], який забезпечує стабільність іншого призматичного типу ядра (C1). Однак для потенціалу Kim MEAM знайдені ядра – базисне ядро V та призматичне ядро C2 – стабільні. Стабільність різних типу ядер пов'язана з

величиною енергій дефектів пакування. Енергія базисного дефекту пакування при нульовому тиску становить 29 мДж/м² для Kim MEAM. Ми не знайшли стабільного призматичного дефекту пакування у випадку потенціалу Kim MEAM. Саме це являється причиною стабільності C2 ядра у випадку Kim MEAM потенціалу і ядра C1, яке містить короткий відрізок дефекту пакування в призматичній площині, у випадку Sun EAM потенціалу.

Раніше було продемонстровано [28] підрахунками методом підштовхуваних пружних смуг (nudged elastic bands – NEB), що міграція ядра В між двома мінімумами в рельєфі Пайєрлса не призводить до значного перетворення ядра. Навпаки, міграція ядра C1 (призматичного ядра для потенціалу Sun EAM [28]) супроводжується перетворенням в ядро C2 посередині шляху (див. рис. 2). У випадку Kim MEAM потенціалу змінюється взаємна стабільність ядер, але C1-C2 перетворення також має місце протягом перескоку між двома мінімумами рельєфу Пайєрлса. Можна припустити, що перехідна дилатація, δV , є різницею між надлишковими об'ємами, ΔV , ядра C1 і C2 у випадку призматичного ковзання. δV приймається як зміна надлишкових об'ємів ΔV під час ковзання на базисній площині.

3. Результати і обговорення

Залежність критичного дозволеного напруження зсуву від гідростатичного тиску показана на рис. 3а для базисного ковзання та рис. 3б для призматичного ковзання для потенціалу Kim MEAM. При використанні Kim MEAM потенціалу CRSS при 0 К та нульовому тиску становить близько 55 МПа та 105 МПа для базисного та призматичного ковзання, відповідно.

Залежність, яка зображена на рис. 3а демонструє, що критичне напруження для базисного ковзання

залишається практично незмінним. Лише для значень тиску вищих за 1000 МПа спостерігається незначне зниження.

Призматичне ковзання $\langle a \rangle$ дислокації демонструє відмінну поведінку, в порівнянні з базисним ковзанням. Потенціал Kim MEAM прогнозує підвищення CRSS для ядра C2 з підвищенням прикладеного тиску (рис. 3б).

Спробуємо пояснити результати, які приведені на рис. 3. Булатов та ін. [20] запропонували, що зміну критичного напруження внаслідок застосування гідростатичного тиску можна оцінити як

$$\Delta\sigma_p = 2\pi\Delta W_p / b^2, \quad (1)$$

де $\Delta W_p = p\delta V$ – зміна енергії Пайєрлса внаслідок роботи гідростатичного тиску p при зміні об'єму системи на δV . δV – це перехідна дилатація, тобто варіація надлишкового об'єму ΔV під час стрибка дислокації між мінімумами рельєфу Пайєрлса. На рис. 4 приведені залежності надлишкових об'ємів від прикладеного тиску для двох типів призматичних дислокацій (C1 та C2), а також для базисної дислокації (B). Для базисної дислокації також приведена залежність перехідного об'єму, визначеного методом приведеним в [20], тобто об'єму в момент початку руху дислокації. Перехідна дилатація, δV , була розрахована, як різниця між надлишковим об'ємом ядер C1 і C2 у випадку призматичного ковзання, і різниці між перехідним і рівноважним об'ємом ядра, у випадку базисного ковзання. Як видно з рис. 4, δV збільшується у першому випадку з ростом тиску і зменшується у другому випадку. У випадку базисного ковзання δV навіть змінює знак. Варто зазначити, що позитивні значення δV мають призводити до збільшення напруження Пайєрлса, тому що прикладений тиск діє проти розширення ядра дислокації. Навпаки, при негативних значеннях δV тиск буде допомагати подолати бар'єр. Залежності приведені на рис. 3 та 4

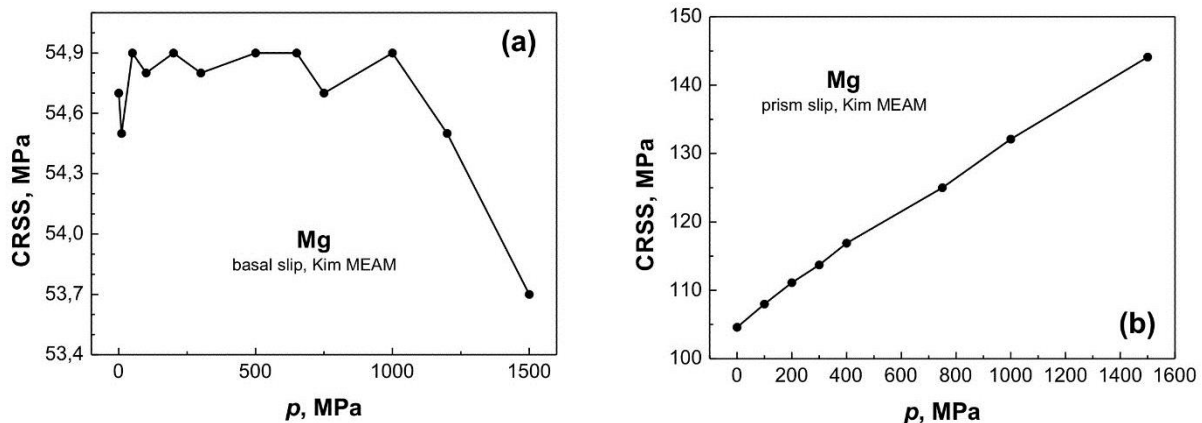


Рис. 3. Залежність CRSS від прикладеного тиску: (а) базисне ковзання; (б) призматичне ковзання.

показують якісну згоду з такою поведінкою. Залежності δV від тиску можна апроксимувати лінійною функцією. Результат такої апроксимації приведений в таблиці 1. Після підстановки у формулу (1) можна дістати оцінку залежності критичного напруження від тиску для базисного і призматичного ковзання. Результат приведений на рис. 5. Знову можна констатувати, що груба оцінка за допомогою формули (1) виявляє ознаки якісної згоди з результатами атомістичного моделювання. Очевидно, не можна очікувати точної кількісної згоди, але можна зробити висновок, що залежність перехідної дилатації ядра дислокації від тиску відіграє ключову роль при зміні критичного напруження ковзання дислокацій.

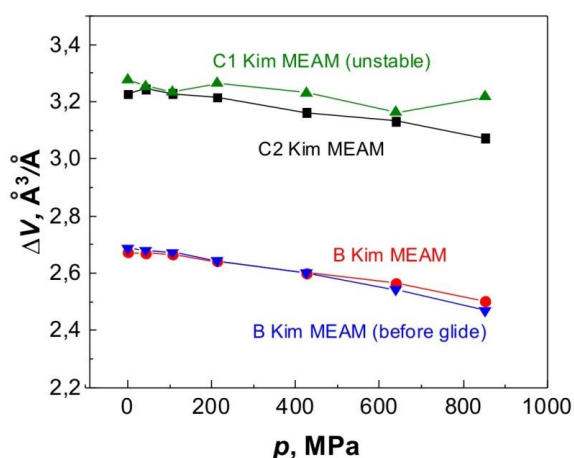


Рис. 4. Залежність надлишкового об'єму дислокації від гідростатичного тиску.

Таблиця 1.

Залежність перехідного розширення ядра δV від тиску, p в МПа

Ковзання	δV	Kim MEAM
базисне	$\alpha p + \beta$	$\alpha = -0.3955e-24$ $\beta = 0.1326e-21$
призматичне	$\gamma p + \delta$	$\gamma = 0.106e-23$ $\delta = 0.16e-21$

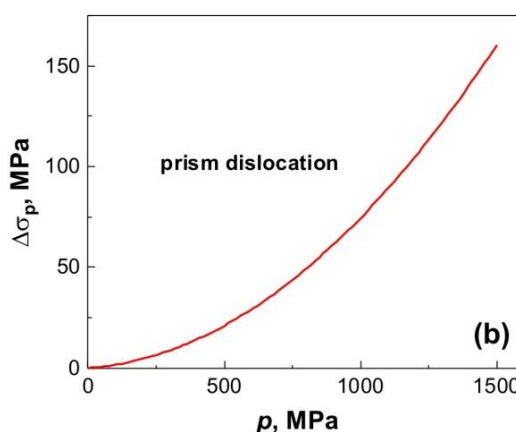
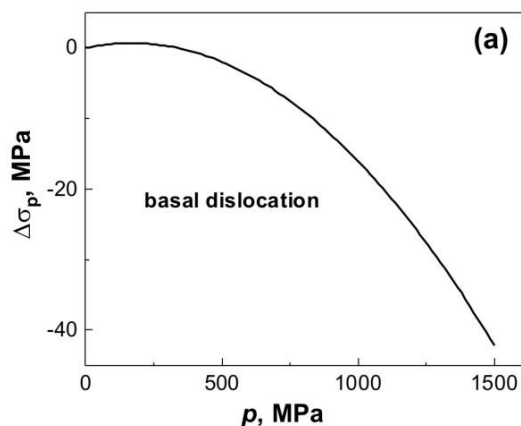


Рис. 5. (а) Залежність зміни критичного напруження від гідростатичного тиску для базисної дислокації; (б) Залежність зміни критичного напруження від гідростатичного тиску для призматичної дислокації.

Висновки

1. Отримані залежності критичного дозволеного напруження зсуву дислокацій від тиску для базисного та призматичного ковзання для потенціалу Kim MEAM при комп'ютерному моделюванні магнію. Встановлено, що застосування тиску може змінити CRSS для базисного та призматичного ковзання гвинтової $\langle a \rangle$ дислокації. CRSS при 0 K та нульовому тиску становить близько 55 МПа та 105 МПа для базисного та призматичного ковзання відповідно. Залежність CRSS для базисного ковзання залишається практично незмінною до 1000 МПа, після чого спостерігається незначне зниження. Призматичне ковзання $\langle a \rangle$ дислокації демонструє підвищення критичного дозволеного напруження зсуву для ядра C2 з підвищенням прикладеного тиску.

2. Ефект зміни критичного дозволеного напруження зсуву залежить від структури дислокаційного ядра в залежності від початкового положення центру пружного поля (В і C2). Ядро В дисоціюється в базисній площині. C2 поширюється вздовж призматичної площини. Було встановлено, що ядро C2 стабільне з потенціалом Kim MEAM під нульовим гідростатичним тиском на відміну від Sun EAM. Така ситуація зумовлена наявністю стабільного призматичного дефекту пакування в потенціалі Sun EAM та його відсутністю у потенціалі Kim MEAM.

3. Було продемонстровано, що залежність критичного дозволеного напруження зсуву від тиску визначається залежністю від тиску перехідної дилатації ядра дислокації. Перехідна дилатація, δV , розрахована, як різниця між надлишковим об'ємом ядер C1 і C2 у випадку призматичного ковзання, і різниця між перехідним і рівноважним об'ємом ядра, у випадку базисного ковзання, збільшується у першому випадку з ростом тиску і зменшується та змінює знак у другому випадку. Оцінка залежності критичного напруження від тиску для базисного і призматичного

ковзання виявляє ознаки якісної згоди з результатами атомістичного моделювання.

Подяка

Ця робота була підтримана двостороннім проєктом мобільності Міністерства освіти, молоді та спорту Чеської Республіки [грант № 8J19UA037] та Міністерства освіти і науки України [грант № 0120U103623]. Ця робота виконана з використанням обчислювальних засобів ґрід-кластера ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна – Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної академії наук України.

References/Literature

1. M.M. Avedesian, H. Baker. *Magnesium and Magnesium Alloys*, (ASM International, Materials Park, OH, 1999), 350 p.
2. J.W. Christian, S. Mahajan. *Prog. Mater. Sci.*, **39**, 1 (1995).
3. A. Chapius, J.H. Driver. *Acta Mater.*, **59**, 1986 (2011).
4. H. Asgari, J.A. Szpunar, A.G. Odeshi. *Mater. Des.*, **61**, 26 (2014).
5. M.A. Kumar, I.J. Beyerlein, C.N. Tome. *J. Alloys Comp.*, **695**, 1488 (2016).
6. S. Biswas, S.S. Dhinwal, S. Suwas. *Acta Mater.*, **58**, 3247 (2010).
7. P. Molnar, A. Jager. *Philos. Mag.*, **93**, 3612 (2013).
8. R.Z. Valiev, T.G. Langdon, *Progr. Mater. Sci.*, **51**, 881 (2006).
9. J. Horky, A. Ghaffar, K. Werbach, et. al. *Materials*, **12**, 2460 (2019).
10. C.F. Gu, L.S. Toth, D.P. Field, J.J. Fundenberger, Y.D. Zhang. *Acta Mater.*, **61**, 3027 (2013).
11. F. Kang, J.Q. Liu, J.T. Wang, X. Zhao. *Scripta Mater.*, **61**, 844 (2009).
12. F. Kang, J.Q. Liu, J.T. Wang, et. al. *Int. J. Mat. Res.*, **100**, 1686 (2009).
13. V.V. Stolyarov, R. Lapovok, I.G. Brodova, P.F. Thomson. *Mater. Sci. Eng. A*, **357**, 159 (2003).
14. F.R.N. Nabarro, T.R. Duncan. *Can. J. Phys.*, **45**, 939 (1967).
15. M.S. Duesberry. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, **392**, 145 (1984).
16. R. Gröger. *Phil Mag.*, **94**, 2021 (2014).
17. J.A. Barendrecht Jr., W.N. Sharpe. *J. Mech. Phys. Solids*, **21**, 113 (1973).
18. A. Ostapovets, O. Vatazhuk. *Comp. Mater. Sci.*, **142**, 261 (2018).
19. S. Yoshikawa, D. Matsunaka. *Mater. Trans.*, **61**, 127 (2020).
20. V.V. Bulatov, O. Richmond, M.V. Glazov. *Acta mater.*, **47**, 3507 (1999).
21. Y.-M. Kim, N. J. Kim, B.-J. Lee. *CALPHAD*, **33**, 650 (2009).
22. S. Plimpton. *J. Comp. Phys.*, **117**, 1 (1995).
23. A. Stukowski. *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.*, **18**, 015012 (2009).
24. J.A. Yasi, T. Nogat, D.R. Trinkle, et. al. *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.*, **17**, 055012 (2009).
25. Z. Wu, M. Francis, W. Curtin. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, **23**, 015004 (2015).
26. X.Y. Liu, J.B. Adams, F. Ercolessi, J.A. Moriarty. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, **4**, 293 (1996).
27. I. Shin, E.A. Carter. *Int. J. Plasticity*, **60**, 58 (2014).
28. A. Ostapovets, O. Vatazhuk. *Low. Temp. Phys.*, **43**, 421 (2017).
29. C.D. Barrett, L.R. Carino. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, **5**, 9 (2016).
30. J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of dislocations*, New York, McGraw-Hill, 1968, p.780.
31. D.Y. Sun, M.I. Mendeleev, C.A. Becker, et. al. *M. Asta, Phys. Rev. B*, **73**, 024116 (2006).