

## ОСОБЕННОСТИ ДИСЛОКАЦИОННЫХ РЕАКЦИЙ НА ПРИМЕРАХ ДВУХМЕРНЫХ КРИСТАЛЛИТОВ

Л.С. Метлов

Донецкий физико-технический институт НАН Украины им. А.А. Галкина,  
ул. Р.Люксембург, 72, Донецк, 83114, Украина, [metlov@mail.donbass.com](mailto:metlov@mail.donbass.com)

Методами молекулярной динамики (МД) с потенциалом Леннард-Джонса проведены систематические исследования интенсивных пластических деформаций двухмерных металлических кристаллитов по основным схемам нагружения. В тестовом эксперименте на одноосное сжатие движущимися жесткими гранями с потенциальной энергией в качестве идентификационного признака удалось наблюдать красивую реакцию разворота плоскостей скольжения пары дислокаций (рис 1). В данной дислокационной реакции сохраняется не только суммарный (нулевой) дислокационный заряд до и после реакции, но и момент дислокационного заряда (расстояние между плоскостями скольжения). Реакция осуществляется за счет генерации в момент пробоя материала (рис 1б) частичной дислокации аналогично [1]. Возможно, вариант синхронного взаимодействия дислокаций с помощью частичной дислокации обусловлен их близостью, то есть малостью момента пары дислокационных зарядов. При больших исходных расстояниях каждая из дислокаций самостоятельно распадется и, возможно, не одновременно, на две, по одной из которых будут иметь плоскости скольжения параллельные внешним жестким граням. Вторая же пара дислокаций будет иметь плоскости скольжения, образующие угол  $60^\circ$ , как с плоскостями скольжения исходных дислокаций, так и с плоскостями скольжения дислокаций из предыдущей результирующей дислокационной пары. При этом вторая пара не обязательно должна иметь нулевой момент дислокационного заряда, как в описанном выше примере, благодаря чему эти две дислокации как бы аннигилируют непосредственно в момент своего рождения. Если момент дислокационного заряда не равен нулю, то эта пара не может аннигилировать обычным способом, что приводит к увеличению общего количества дислокаций в системе. Таким образом, при наличии в системе достаточного количества накопленной на предыдущих стадиях деформирования потенциальной энергии ее релаксация может протекать по взрывному механизму каскадной генерации большого количества дислокаций.

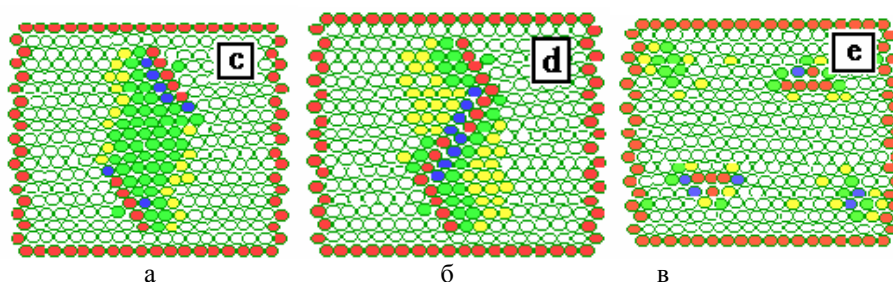


Рис. 1. Одноосное сжатие жесткими гранями кристаллита  $18 \times 18$  атомов. Более горячие цвета соответствуют большему значению потенциальной энергии частиц.

Другой пример нетривиального хода дислокационной реакции получен для случая одноосного сжатия двухмерного кристаллита мягкими гранями (рис. 2). Последние

задавались периодическими граничными условиями вдоль оси сжатия. На определенном этапе деформирования в кристаллите возникли две дислокации 1 и 2, плоскости скольжения которых пересекаются (рис. 2а). Дислокация 2 быстрее приближается к точке пересечения плоскостей скольжения, и своим движением тормозит дислокацию 1, которая в этот момент переходит в более локализованное структурное состояние (рис. 2б) и замедляет свое движение. Дислокация 2 минует точку пересечения и продвигается от нее на некоторое расстояние по ходу своего движения (рис. 2в). Только после этого движение дислокации 1 возобновляется, она снова переходит в нелокализованное состояние и подходит к точке пересечения плоскостей скольжения (рис. 2в-г). В этот момент дислокация 2 меняет знак своего движения и *возвращается* к точке пересечения плоскостей скольжения, где обе дислокации вступают в реакцию (рис. 2г). В результате слияния дислокаций появляется дислокация 3, плоскость скольжения которой параллельна плоскостям сжимающих внешних граней. Такое поведение представляется несколько парадоксальным с точки зрения минимизации общей энергии системы. Если в какой-то момент времени энергетически выгодным для системы оказывается состояние с одной дислокацией, то, казалось бы, дислокации должны искать кратчайший путь для своего воссоединения. Однако их воссоединение проходит через ряд нетривиальных стадий “психологического” порядка, включая чередование стадий запирания и отпираания их взаимного движения.

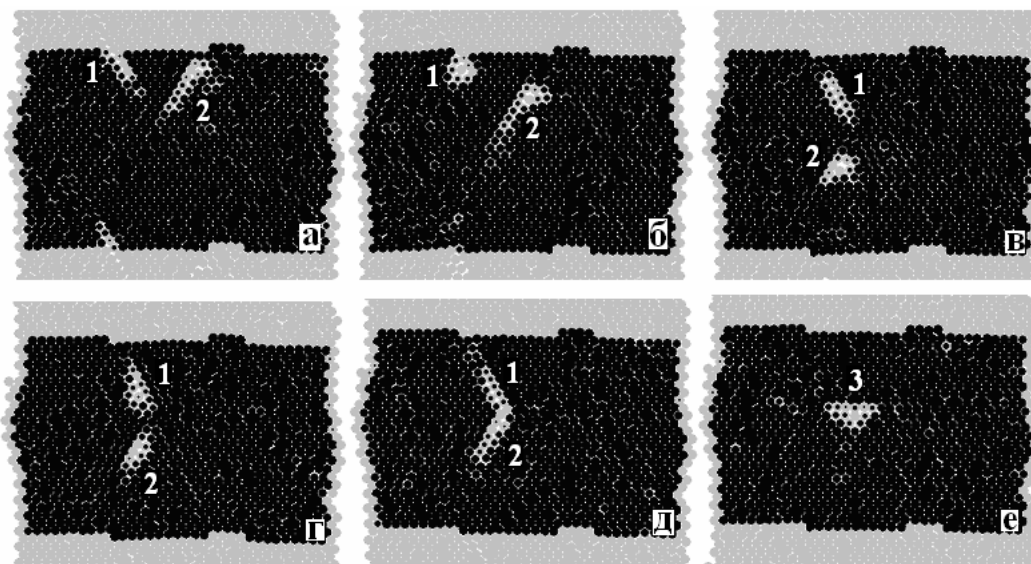


Рис. 2. Одноосное сжатие мягкими гранями кристаллита 30\*30 атомов. Более светлые оттенки соответствуют большему значению потенциальной энергии частиц.

Размножение дислокаций за счет описанного в первом примере каскадного механизма дислокационных реакций может быть дополнено и прямым рождением пары дислокаций непосредственно из поля напряжений. Ниже приведен пример, иллюстрирующий такую возможность для одноосного сжатия кристаллита жесткими гранями (рис. 3). На определенном этапе деформирования образце сформировалась система дислокаций 1, 3, 4. Одновременно, в области кристаллита, очерченной эллипсом, наблюдаются повышенные значения потенциальной энергии. В момент времени зафиксированном на среднем кадре (рис. 3б) из энергетического сгустка рождается пара дислокаций 5,6. Одна из них (5-тая) перемещается вдоль плоскости скольжения в верхнем направлении, вторая (6-тая) вниз образца, где вступает в дислокационную реакцию с дислокацией 3. В результате их слияния

образуется дислокация 7. Возможно, одних только внешних макроскопических напряжений не достаточно для рождения пары в “бездефектной” области кристаллической решетки, а необходимые пороговые напряжения возникают за счет локальных перенапряжений вызванных уже существующими дислокациями.

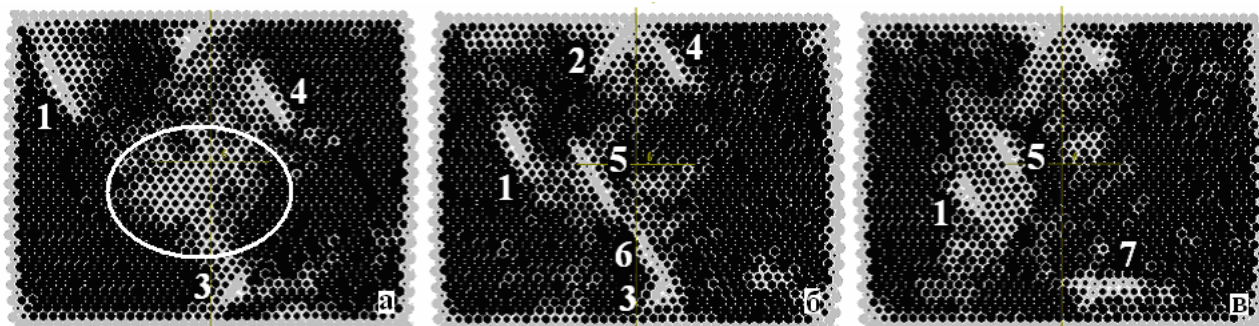


Рис. 3. Одноосное сжатие жесткими гранями кристаллита 40\*40 атомов. Маркировка такая же как на рис. 2.

Обращает на себя внимание тот факт, что в многочисленных проведенных автором численных компьютерных экспериментах дислокации демонстрировали способность менять в процессе деформирования свое структурное состояние [2]. Например, дислокация 1 (рис. 2б) и дислокация 2 (рис. 2в) находятся в локализованном состоянии, в то время как в остальных случаях они находятся в нелокализованном распределенном вдоль плоскости скольжения состоянии. Причем всегда перед началом интенсивного движения дислокации переходят из локализованного структурного состояния в нелокализованное. Согласно теории Коттрелла [3] дислокации в нелокализованном состоянии обладают более высокой подвижностью. Исходя из этого факта, можно объяснить причину, по которой наноматериалы одновременно обладают и высокой прочностью и высокой пластичностью. Границы нанозерен образуются из дислокаций, находящихся в наиболее локализованном состоянии [2]. Низкая подвижность таких дислокаций обуславливает более высокий порог пластичности, то есть более высокую прочность. По достижении порога пластичности дислокации переходят в делокализованное состояние, благодаря чему материал легко пластически деформируется.

### Список литературы

- [1] K. Kaski, A. Kuronen, and M. Robles, in Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XIV, edited by D.P. Landau, S.P. Levis, and H.B. Shcutler, v. **98**, of Springer Proceeding in Physics, p. 12-26, Heidelberg, Berlin, 2001, Springer verlag.
- [2] L. S. Metlov, <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0210486>, 1, print 23 Oct 2002 (2002).
- [3] А. Коттрел. Теория дислокаций, Мир, М. (1969). С. 96.