

УДК 538.951

СДВИГОВАЯ ПРОЧНОСТЬ Al–Cu СПЛАВА С РАЗНЫМИ ТИПАМИ УПРОЧНЯЮЩИХ ВКЛЮЧЕНИЙ: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА И КОНТИНУАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

© 2023 г. П. А. Безбородова¹*, В. С. Красников¹, М. Р. Газизов²,
А. Е. Майер¹, В. В. Погорелко¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Челябинский государственный университет”, Челябинск, Россия

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Белгородский государственный национальный исследовательский университет”, Белгород, Россия

*E-mail: ibragimova-polin@mail.ru

Поступила в редакцию 22.05.2023 г.

После доработки 19.06.2023 г.

Принята к публикации 28.07.2023 г.

Выполнено молекулярно-динамическое исследование движения дислокаций в алюминии, содержащем упрочняющие включения меди. Рассмотрено взаимодействие дислокации с четырьмя экспериментально наблюдаемыми типами включений. Определена энергия дислокационных сегментов, прикрепленных к упрочняющим фазам, используемая в качестве параметра континуальной модели взаимодействия дислокации и включений.

DOI: 10.31857/S036767652370271X, EDN: FOQZPF

ВВЕДЕНИЕ

Алюминиевые сплавы широко применяются как конструкционные материалы во многих сферах человеческой деятельности. Высокая удельная прочность алюминиевых сплавов достигается в процессе термической обработки за счет образования упрочняющих фаз при миграции растворенных атомов легирующих элементов [1]. Известно, что реальные сплавы, помимо выделений различных фаз, содержат и другие нарушения кристаллической решетки. В их структуре наблюдаются точечные и протяженные дефекты – вакансии, дислокации и границы зерен. Движение линейных дефектов – дислокаций, представляющих собой края атомных полуплоскостей, во многом определяет особенности протекания пластической деформации [2]. В тех случаях, когда интерметаллические включения действуют как барьеры для движения дислокаций, происходит упрочнение [3, 4]. Когда включения вторых фаз облегчают движение дислокаций, сплав становится хрупким или ослабляется.

Последовательность выделения упрочняющих фаз в процессе старения сплава происходящей по следующей схеме: пересыщенный твердый раствор → ГП1 → ГП2 → θ'' → θ' → θ [5]. На начальном этапе термообработки атомы меди, расположенные в хаотичном порядке, собираются в определенных местах алюминиевой матрицы, образуя структурированные включения из атомов меди – зоны Гинье–Престона (ГП) первого и

второго типов [6]. Зоны Гинье–Престона выделяются в виде тонких дискообразных включений толщиной в несколько атомных слоев и диаметром 5–100 нм. Первый тип зоны ГП представляет собой медный диск, окруженный алюминиевой матрицей. Дальнейшая тепловая обработка приводит к образованию зон ГП второго типа, состоящих из двух параллельных слоев меди, разделенных тремя слоями атомов алюминия. Структура θ'' фаз эквивалентна зонам ГП2, но состоит из трех или более атомных слоев меди. После выделения θ'' фазы, при последующей термообработке, происходит преобразование в фазу, обозначаемую θ' . θ' фаза является наиболее важным упрочняющим включением в сплавах Al–Cu. Она имеет тетрагональную решетку ($I\bar{4}m2$) с параметрами: $a = 4.04 \text{ \AA}$ и $c = 5.80 \text{ \AA}$. Включения перечисленных типов параллельны плоскости $(100)_{Al}$. При дальнейшем старении в расплаве образуется полностью не когерентная θ фаза, для которой реализуется большое число возможных сопряжений решетки включения и матрицы [7].

Развитие методов электронной микроскопии позволяет исследовать атомарную структуру упрочняющих включений с нанометровым разрешением. Анализ полученных изображений приводит к выводу о существовании более сложных типов решеток упрочняющих включений по сравнению с традиционно рассматриваемой последовательностью выделения упрочняющих фаз [8–11]. Авторами [12] было получено детальное

изображение θ' с чередующимися атомами алюминия и меди на межфазной границе. В работах [13] экспериментально зафиксированы структуры с ГП-подобными слоями на межфазной границе θ' . Из микрофотографий в работе [14] видно, что θ' -фаза может иметь удлиненные слои атомов меди вдоль широких границ раздела, по сравнению с внутренней структурой.

Поскольку взаимодействие дислокаций и упрочняющих включений в значительной мере определяет механические свойства сплавов, а особенности кристаллической структуры включений влияют на их сопротивление к сдвигу во время взаимодействия с дислокацией, то исследование связи структуры и стойкости к сдвигу представляется актуальной задачей. Развитие методов атомистического моделирования позволяет исследовать процесс взаимодействия дислокации и упрочняющего включения, получая в качестве результата основные механизмы взаимодействия, реализующиеся для конкретного типа включений, и числовые характеристики этого процесса. В последнее десятилетие методы атомистического моделирования применялись для изучения взаимодействия дислокаций с препятствиями в сплавах различных составов [8, 15–19].

Методы атомистического моделирования позволяют изучить детально взаимодействие дислокации и упрочняющего включения, однако им присущи ограничения пространственных и временных масштабов. Для преодоления этих ограничений используются методы многомасштабного моделирования, объединяющие атомистическое и континуальное моделирование. В работах [8, 15–17] предложена методика моделирования напряжения течения сплава, включающая в себя атомистическое моделирование, континуальное моделирование взаимодействия дислокации и препятствий и метод дискретной дислокационной динамики. Результаты, полученные с помощью многомасштабного исследования, находятся в хорошем согласии с экспериментально измеренными напряжениями течения алюминиевых сплавов. Однако во всех приведенных работах рассматривались упрочняющие включения из классической последовательности системы Al–Cu. В настоящей работе с помощью молекулярно-динамических (МД) расчетов проведено исследование роли кристаллической структуры включений типа θ' -фазы на их стойкость к сдвигу во время взаимодействия с дислокацией. Из сравнения с МД данными определены параметры континуальной модели взаимодействия дислокации и включения четырех типов.

МД ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИСЛОКАЦИИ И ВКЛЮЧЕНИЯ

Элементарная ячейка θ' -фазы содержит атомы Al и Cu в соответствующих позициях (рис. 1(a, б,

Таблица 1. Энергия взаимодействия дислокаций с включениями в модели при разных температурах

T, K	$\epsilon_{s-\theta'}^p, \text{эВ/б}$	$\epsilon_{f-\theta'}^p, \text{эВ/б}$	$\epsilon_{h-\theta'}^p, \text{эВ/б}$	$\epsilon_{(h+\gamma)-\theta'}^p, \text{эВ/б}$
100	1.07	1.12	1.2	1.3
300	0.8	0.96	1.1	1.23
500	0.7	0.78	0.95	1.05
700	0.67	0.67	0.85	0.9

в, з)). Важной особенностью решетки θ' является наличие в ней плоскостей с квадратной сеткой атомов и параметрами, близкими к параметрам решетки алюминиевой матрицы. По этим плоскостям сохраняется когерентная связь с алюминиевой матрицей. По другим плоскостям, где наблюдаются слои атомов меди, решетка θ' и алюминиевая матрица не согласуются, и образуются границы раздела. Для сравнения на рис. 1 (a–z) показаны элементарные ячейки других типов θ' -фазы, наблюдаемых в экспериментах.

На основе элементарной ячейки с помощью программы AtomsK [20] создавались включения, диаметром 20 нм и шириной в 9 атомных слоев, что соответствует экспериментально наблюдаемым данным. Первый тип – это однофазная структура с тетрагональной решеткой (s). Вторым тип (f) – структура с добавленными атомами алюминия на межфазной границе между атомами меди, на межфазной границе сохраняется ГЦК порядок атомов. Третий тип (h) имеет сэндвич-структуру с тетрагональной θ' решеткой в сердцевине и ГП-подобными структурами вдоль широких межфазных границ. Четвертый вариант структуры (h + γ) – структура θ' с ГП прослойками на границах раздела и дополнительными атомами меди в форме обода толщиной в один атом на межфазных границах. Структуры включений, встроенные в алюминиевую матрицу, показаны на рис. 1 (a–z).

Полученные включения имеют цилиндрическую форму с основаниями, параллельными плоскости (100) алюминиевой решетки. Затем включения встраивались в алюминиевую матрицу. Поскольку θ' -фаза когерентна с плоскостями (100), начальные оси атомной системы ориентированы вдоль кристаллографических направлений [100], [010] и [001]. Движение дислокации и взаимодействие с θ' -фазами исследуются по схеме, предложенной в [21] для системы скольжения $[\bar{1}10](111)$, типичной для ГЦК металлов. Оси системы координат, используемой для исследования движения дислокации, ориентированы вдоль кристаллографических направлений: ось x ориентирована в соответствии с кристаллографическим направлением $[\bar{1}10]$, ось y – вдоль направления [111], ось z – вдоль направления $[11\bar{2}]$. При такой ориентации ось x направлена вдоль вектора Бюр-

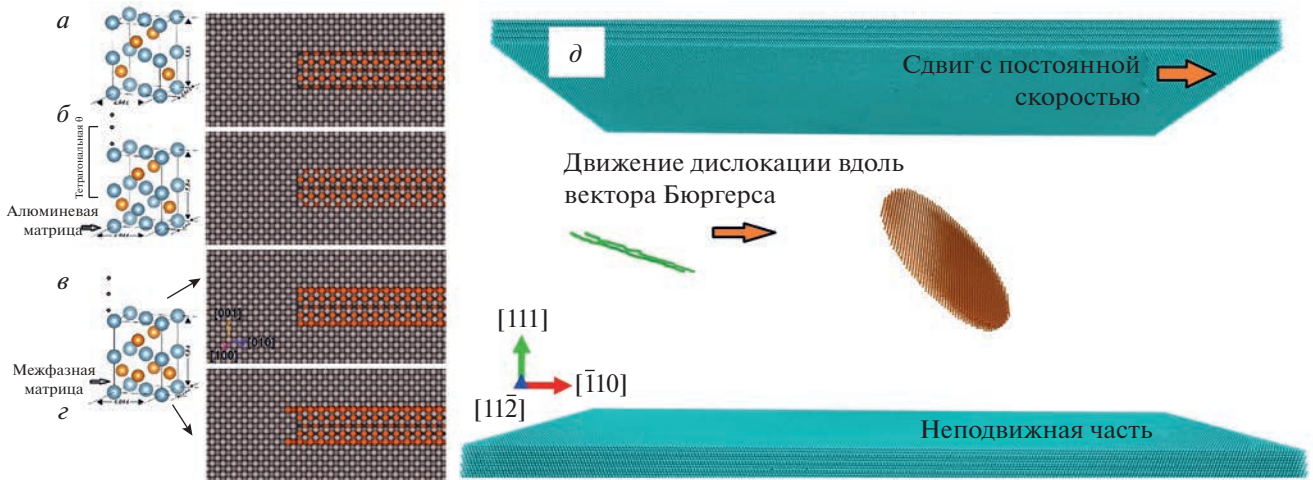


Рис. 1. Элементарная ячейка и включение в алюминиевой матрице: (а) $s\text{-}\theta'$, (б) $f\text{-}\theta'$, (в) $h\text{-}\theta'$ и (г) $(h + r)\text{-}\theta'$; расчетная область и взаимная ориентация дислокации и включения θ' фазы (д).

гера идеальной краевой дислокации, ось z направлена вдоль касательного вектора дислокации, а ось y ориентирована перпендикулярно плоскости скольжения. В системе, содержащей 9000000 атомов и объемом $77 \times 60 \times 32 \text{ nm}^3$, задаются периодические граничные условия в направлениях осей x и z , а непериодические граничные условия накладываются вдоль оси y . Дислокация создается в расчетной области путем добавления дополнительной атомной полуплоскости. В начальный момент эта линия идеальной дислокации направлена вдоль оси z , а вектор Бюргера направлен вдоль оси x системы координат. Движение дислокации в кристалле возникает за счет внешних сдвиговых деформаций. Реализация сдвиговой деформации системы происходит следующим образом: верхний слой атомов толщиной 5 межатомных расстояний сдвигается с постоянной скоростью $4.2 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1}$ относительно оси x , в то время как нижний слой атомов такой же толщины остается неподвижным (рис. 1д). Во время моделирования деформации системы использовался NVE ансамбль частиц, а температура поддерживалась термостатом Берендсена [22]. МД расчеты выполнялись с помощью программного пакета LAMMPS [23]. Деформация системы продолжается в течение примерно десяти взаимодействий дислокации с препятствием. Взаимодействие атомов описывается с помощью потенциала ADP [24]. Используемый потенциал хорошо воспроизводит упругие константы, энергии различных дефектов в обоих металлах и интерметаллидных фазах. Анализ и визуализация полученных атомных распределений осуществляется с помощью пакета OVITO [25].

Взаимодействия дислокации с включением приводят к формированию пилообразных зависимостей среднего по объему системы напряжения сдвига от времени, как это видно на рис. 2 (а–г).

После первого взаимодействия каждый пик соответствует взаимодействию дислокации, прошедшей через периодическую границу, с включением. Статистическое сравнение результатов расчетов выполнено при температуре 300 К. На рис. 2а и 2в показано небольшое отклонение уровней напряжений для последующих взаимодействий. При каждом запуске МД расчета начальные распределения скоростей атомов были разные при одной и той же температуре. Следует отметить наличие двух четко различимых уровней напряжений для первого взаимодействия для двух типов включений, это связано с незначительным различием механизма первого взаимодействия дислокации с включениями обоих типов. Рассмотрим разницу на примере $s\text{-}\theta'$. Для участка с более низким значением напряжений на кривой характерен механизм взаимодействия Орована, описанный в [26]. Дислокационный сегмент, обходящий включение, движется по обратной стороне включения, реализуя классический механизм Орована. В случае более высокого значения напряжения на графике в системе происходит смещение дислокации в соседнюю плоскость скольжения. На вытянутом дислокационном сегменте происходит флуктуация, ведущая к выбросу винтового сегмента дислокации в соседнюю плоскость скольжения. В этом случае дополнительно формируется сегмент, соединяющий дислокационные сегменты в соседних плоскостях скольжения, что увеличивает энергетические затраты и ведет к повышению напряжений преодоления включения в системе.

При последующих взаимодействиях дислокация испытывает сопротивление не только со стороны включения, но и от локального поля напряжений петли Орована, а также от образовавшихся вакансий в системе, что ведет к повышению напряжения. Средний уровень напряжений в систе-

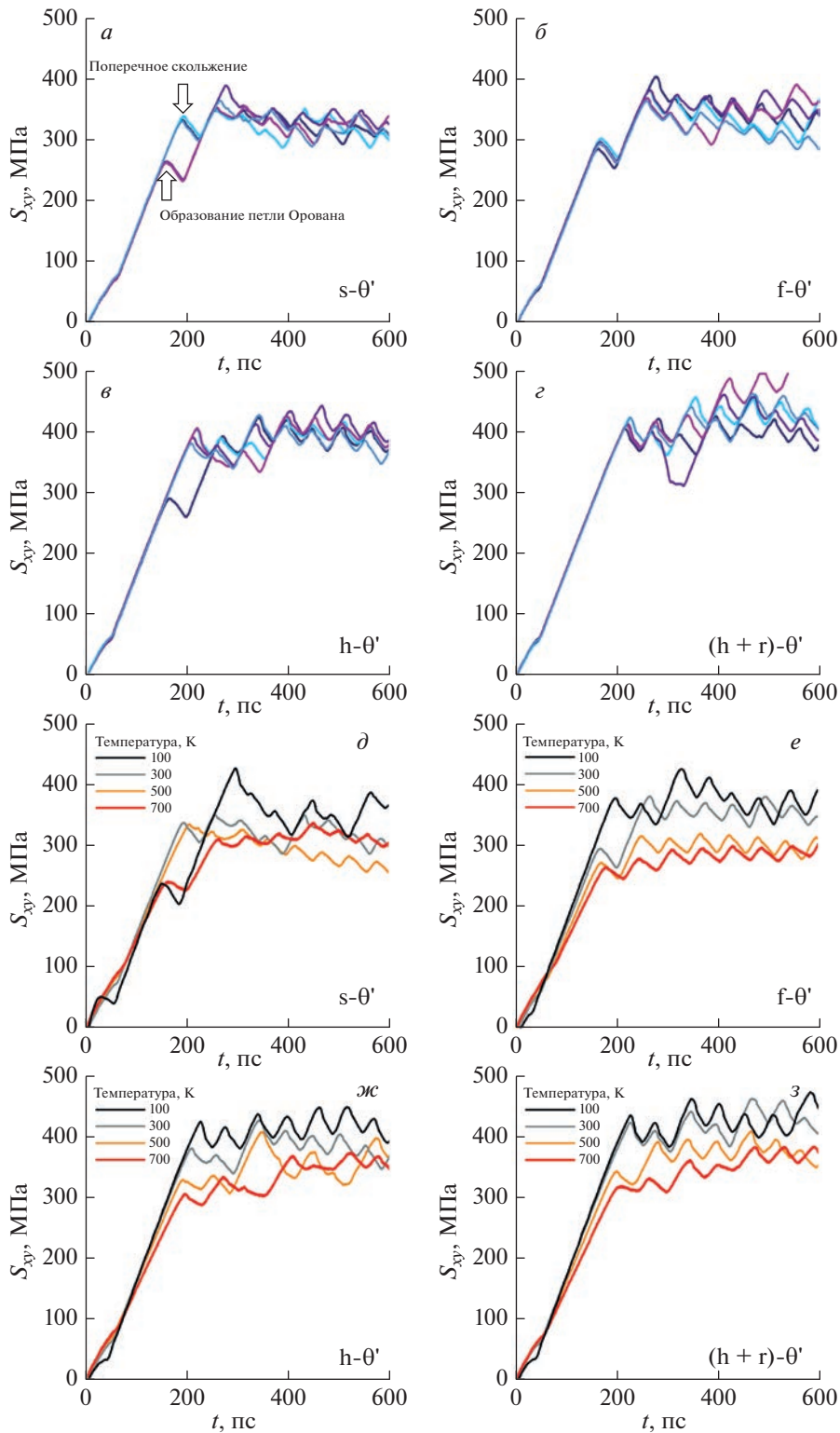


Рис. 2. Средние по системе сдвиговые напряжения: статистический разброс (а–z); средние по системе сдвиговые напряжения: зависимость от температуры (д–z).

ме на рис. 2. повышается при переходе от $s-\theta'$ к $f-\theta'$, далее к $h-\theta'$ и $(h+r)-\theta'$.

На рис. 2 (д–z) показаны усредненные по области напряжения для всех типов включений в за-

висимости от температуры. Для всех рассмотренных типов включений наблюдается уменьшение напряжений с повышением температуры. В среднем сохраняется тенденция к повышению напря-

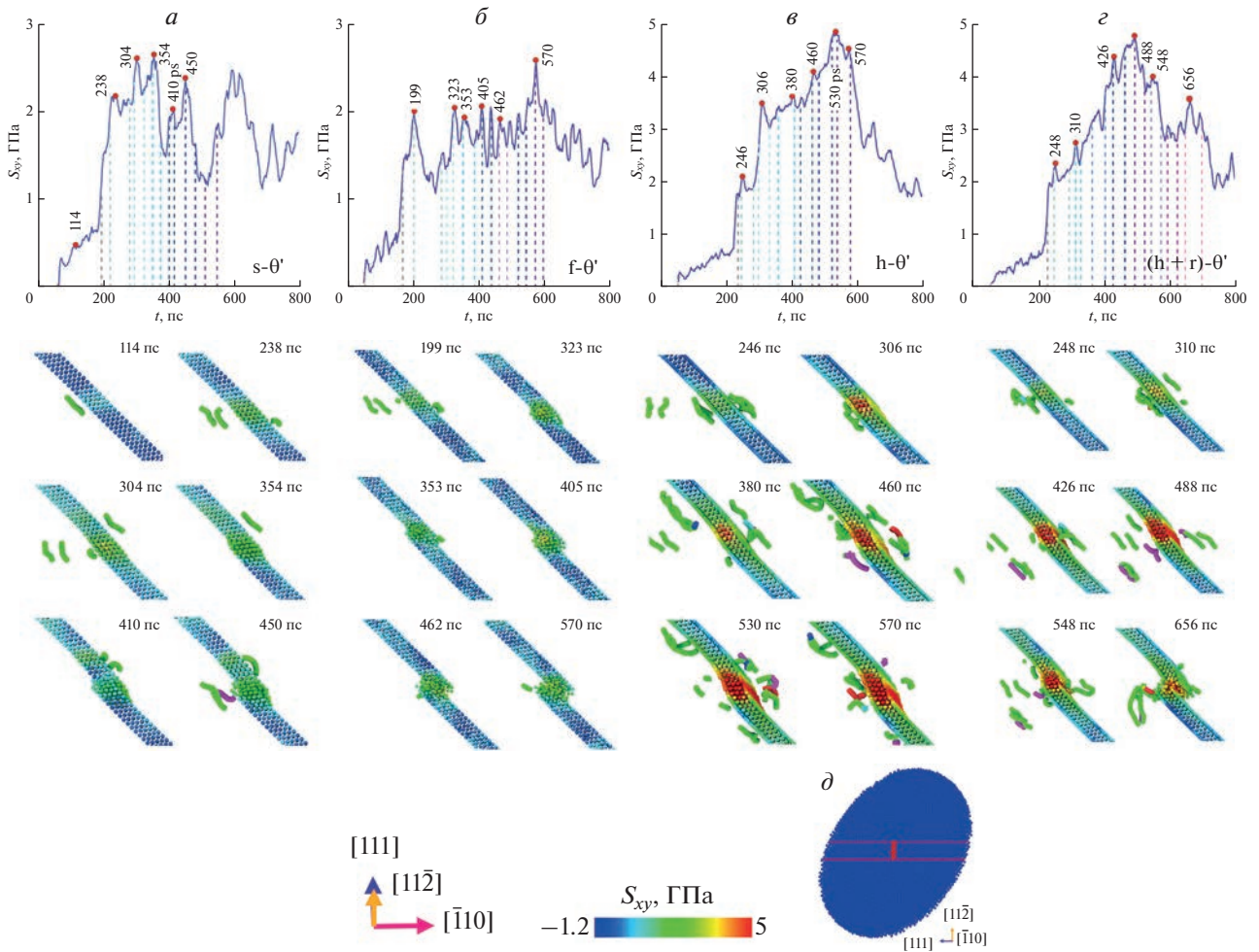


Рис. 3. Локальные сдвиговые напряжения.

жений с изменением типа включений от $s-\theta'$ к $f-\theta'$, далее к $h-\theta'$ и $(h+r)-\theta'$.

Результаты МД показывают, что системы, содержащие $s-\theta'$ и $f-\theta'$, демонстрируют средний уровень сдвиговых напряжений в системе 320–340 МПа. В случае гибридных включений $h-\theta'$ и $(h+r)-\theta'$ эта величина составляет 400–420 МПа. Для объяснения этого явления оцениваются локальные сдвиговые напряжения, действующие на атомы включения, лежащие на плоскости скольжения дислокации (рис. 3).

В объеме включения выбирают центральную область (рис. 3д), содержащую по 20 атомов. Локальные напряжения для обоих типов включений возрастают при первых взаимодействиях с дислокацией. Локальные напряжения для $s-\theta'$ достигают максимума около 2.6 ГПа во время четвертого взаимодействия (рис. 3а), для $f-\theta'$ эта величина составляет 2.9 ГПа при шестом взаимодействии (рис. 3б). Для структур типа $h-\theta'$ и $(h+r)-\theta'$ максимальная величина локальных сдвиговых напряжений соответствует приблизительно 4.9 ГПа и достигается во время седьмого взаимодействия

(рис. 3в и 3г). Таким образом, для гибридных $h-\theta'$ и $(h+r)-\theta'$ фаз напряжение перерезания увеличивается примерно в два раза. Величины локальных напряжений, действующих на включениях, и средних по области напряжений демонстрируют разницу на порядок. Такая большая разница напряжений объясняется двумя факторами: во-первых, сдвиговая жесткость включения во много раз больше, чем у алюминиевой матрицы, что позволяет накапливать высокие локальные напряжения при последовательных взаимодействиях с дислокацией; во-вторых, высокие локальные напряжения мало влияют на средние по системе напряжения из-за малой объемной доли включения. При последовательных взаимодействиях дислокации и включения происходит накопление локальных сдвиговых напряжений, которые приводят к его перерезанию. Структуры $h-\theta'$ и $(h+r)-\theta'$ после нескольких прохождений дислокации искажаются, но намного дольше сохраняют упорядоченную структуру, что свидетельствует о более высоком сопротивлении сдвигу, по сравнению со структурами $s-\theta'$ и $f-\theta'$. В работе [26] было рассчита-

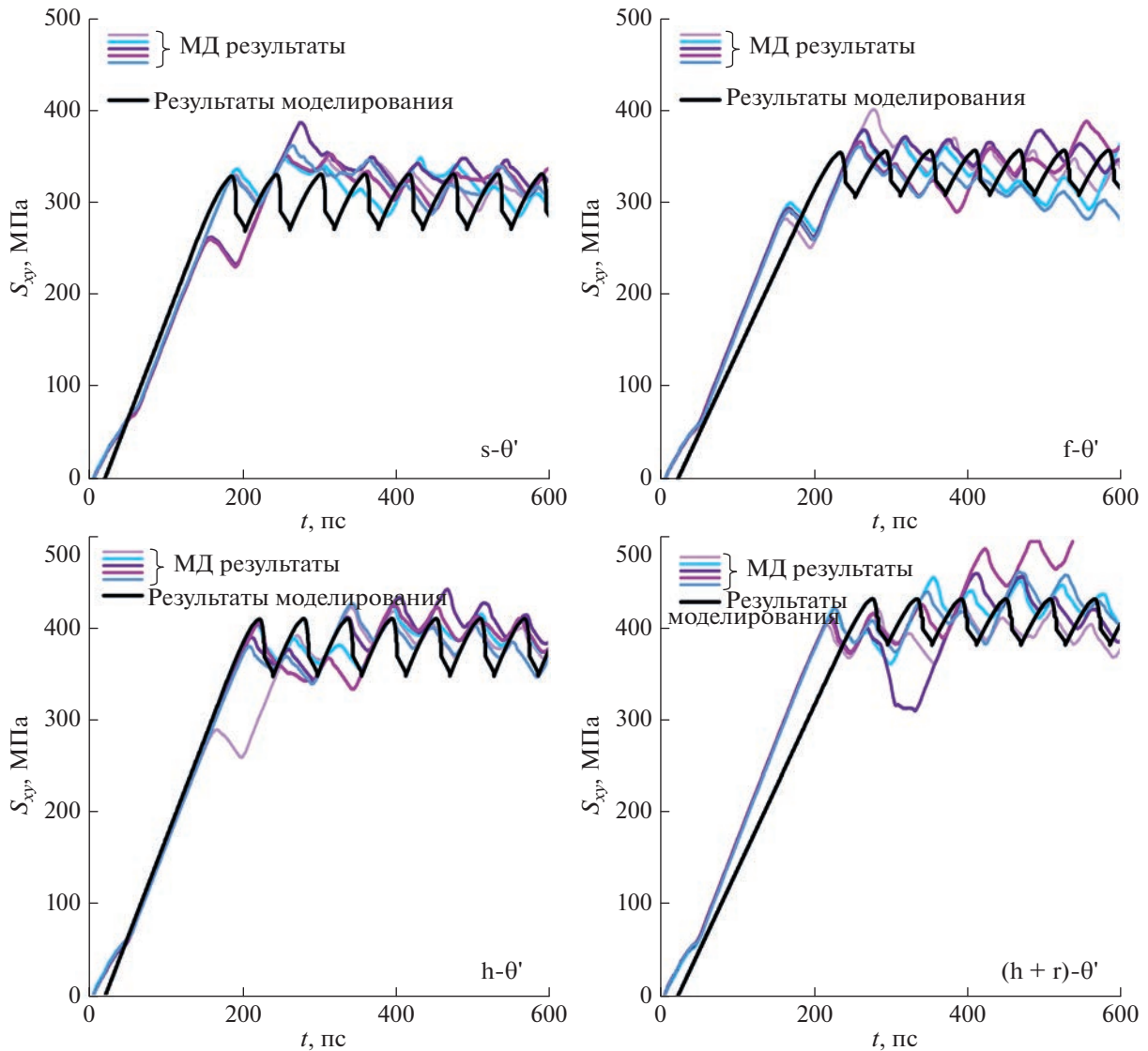


Рис. 4. Среднее напряжение в системах. Сравнение модели и результатов МД.

но критическое локальное сдвиговое напряжение для $s-\theta'$ толщиной 2.2 нм, оно оказалось равным 2.8 ГПа. В настоящей работе максимальное локальное сдвиговое напряжение для $s-\theta'$ составляет 2.6 ГПа при толщине включения 1.4 нм. Установлена зависимость напряжения перерезания $s-\theta'$ от ее толщины с коэффициентом пропорциональности 0.25 ГПа/нм.

Результаты МД используются для калибровки континуальной модели взаимодействия дислокаций с упрочняющими фазами, основанной на формировании петли Орована вокруг включения. Данные МД-моделирования свидетельствуют о том, что механизм взаимодействия Орована реализуется для всех типов включений. Ранее модель формирования петли Орована, основанная на МД-расчетах, была предложена в [26] и уточнена в [15]. Различие между типами включений напря-

мую связано с изменением энергии дислокационных сегментов, прилегающих к включению. Эта энергия зависит от деталей взаимодействия дислокаций и включения, определяемых на атомном уровне структурой включения. Поэтому мы используем эту энергию как постоянный параметр для каждого типа включений и подгоняем его к данным МД по зависимостям среднего напряжения от времени. Подробное описание модели, используемой в данной работе, можно найти в статье [15]. Зависимости напряжения от времени, полученные в соответствии с указанным выше подходом, представлены на рис. 4. Для сравнения использованы данные МД для 300 К. Результаты моделирования хорошо согласуются с поведением среднего напряжения в МД-системе. При комнатной температуре энергии дислокационных сегментов соответствуют значениям 0.8 и

0.96 эВ/б для $s\text{-}\theta'$ и $f\text{-}\theta'$; 1,1 и 1.23 эВ/б для $h\text{-}\theta'$ и $(h+r)\text{-}\theta'$ соответственно, где b – модуль вектора Бюргерса идеальной дислокации в алюминиевой матрице. Остальные параметры модели приведены в [15, 16]. Получено, что энергия дислокационных сегментов, прилегающих к упрочняющим фазам примерно на 40% выше в случае гибридных фаз $h\text{-}\theta'$ и $(h+r)\text{-}\theta'$, что связано с их более высоким сопротивлением сдвигу.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнено молекулярно-динамическое исследование сдвиговой прочности алюминиевых систем с упрочняющими включениями четырех типов, наблюдаемыми в реальных сплавах. Установлено, что для гибридных включений характерно более высокое сопротивление сдвиговой деформации по сравнению с рассмотренными однофазными включениями. В ранее предложенной континуальной модели подобраны энергетические параметры для всех типов структур в широком температурном интервале. Полученные результаты расчетов методом молекулярной динамики находятся в качественном согласии с данными континуального моделирования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-71-10038).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Polmear I.J.* Light metals: from traditional alloys to nanocrystals. 4rd ed. Oxford: Elsevier/Butterworth-Heinemann, 2006.
2. *McDowell D.L.* // *Int. J. Plast.* 2010. V. 26. P. 1280.
3. *Ковалевская Т.А., Данейко О.И.* // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2021. Т. 85. № 7. С. 1002; *Kovalevskaya T.A., Daneyko O.I.* // *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* 2021. V. 85. No. 7. P. 776.
4. *Варюхин В.Н., Малащенко В.В.* // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2018. Т. 82. № 9. С. 1213; *Varyukhin V.N., Malashenko V.V.* // *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* 2018. V. 82. No. 9. P. 1101.
5. *Porter D.A., Easterling K.E., Sherif M.Y.* Phase transformations in metals and alloys. N.Y.: CRC Press, 2014.
6. *Konno T.J., Hiraga K., Kawasaki M.* // *Scripta. Mater.* 2001. V. 44. No. 8–9. P. 2303.
7. *Gao L., Li K., Ni S. et al.* // *J. Mater. Sci. Technol.* 2021. V. 61. P. 25.
8. *da Costa Teixeira J., Cram D.G., Bourgeois L. et al.* // *Acta Mater.* 2008. V. 56. No. 20. P. 6109.
9. *Chen Y., Zhang Z., Chen Z. et al.* // *Acta Mater.* 2017. V. 125. P. 340.
10. *Ma Z., Zhan L., Liu C. et al.* // *Int. J. Plast.* 2018. V. 110. P. 183.
11. *Liu H., Papadimitriou I., Lin F.X., Lorca J.L. et al.* // *Acta Mater.* 2019. V. 167. P. 121.
12. *Zhou L., Wu C.L., Xie P. et al.* // *J. Mater. Sci. Technol.* 2021. V. 75. P. 126.
13. *Bourgeois L., Medhekar N.V., Smith A.E. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 111. Art. No. 069901.
14. *Liu C., Ma Z., Ma P. et al.* // *Mater. Sci. Eng. A.* 2018. V. 733. P. 28.
15. *Krasnikov V.S., Mayer A.E., Pogorelko V.V. et al.* // *Int. J. Plast.* 2020. V. 125. P. 169.
16. *Krasnikov V.S., Mayer A.E., Pogorelko V.V.* // *Int. J. Plast.* 2020. V. 128. Art. No. 102672.
17. *Fomin E.V., Mayer A.E., Krasnikov V.S.* // *Int. J. Plast.* 2021. V. 146. Art. No. 103095.
18. *Mahata A., Zaeem M.A.* // *J. Cryst. Growth.* 2019. V. 527. Art. No. 125255.
19. *Haapalehto M., Pinomaa T., Wang L., Laukkanen A.* // *Comput. Mater. Sci.* 2022. V. 209. Art. No. 111356.
20. *Hirel P.* // *Comput. Phys. Comm.* 2015. V. 197. P. 212.
21. *Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I.* // *Mater. Sci. Rep.* 1993. V. 9. 251.
22. *Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F.* // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. Art. No. 8.
23. *Plimpton S.* // *J. Comp. Phys.* 1995. V. 117. P. 1.
24. *Apostol F., Mishin Y.* // *Phys. Rev. B.* 2011. V. 83. Art. No. 054116.
25. *Stukowski A.* // *Mater. Sci. Eng.* 2010. V. 18. Art. No. 015012.
26. *Krasnikov V.S., Mayer A.E.* // *Int. J. Plast.* 2019. V. 119. P. 21.

Shear strength of Al–Cu alloy with different types of hardening precipitates: molecular dynamics and continuum modeling

P. A. Bezborodova^{a, *}, V. S. Krasnikov^a, M. R. Gazizov^b, A. E. Mayer^a, V. V. Pogorelko^a

^aChelyabinsk State University, Chelyabinsk, 454001 Russia

^bBelgorod State National Research University, Belgorod, 308015 Russia

*e-mail: ibragimova-polin@mail.ru

A molecular dynamics study of the motion of dislocations in aluminum containing hardening copper precipitates is carried out. The paper considers the interaction of dislocation with four types of precipitates, the structure of which was determined in experimental work. The energy of dislocation segments attached to hardening phases is determined and used as a parameter of the continuum model of the dislocation-precipitate interaction. An increase in energy is observed for hybrid precipitates compared to non-hybrid ones.

Keywords: Al–Cu alloy, molecular dynamics, hardening precipitate, dislocation, shear strength