МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт прикладной математики и механики
Кафедра теоретической механики

Работа допущена к защите

Зав. кафедрой, д.ф.-м.н., проф.

_____ А. М. Кривцов

"__"_____

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание академической степени

МАГИСТРА

Тема:

Моделирование движения дислокаций в нанокомпозитах на основе железа

Направление: 010800 – Механика и математическое моделирование

Выполнил студент гр. 63604 И. О. Гладков

Руководитель, асс. каф. теор. мех. А. Ю. Панченко

Консультант по вопросам охраны труда, к.т.н., доц. В. В. Монашков

Санкт-Петербург
2015

АННОТАЦИЯ

В работе описана общая структура современных атомистических моделей, служащих для изучения скольжения дислокации в металле. Проведено исследование движения краевой дислокации в кристалле альфа-железа без дополнительных препятствий и с препятствием в виде нанопластинки графена методом молекулярной динамики. Получены коэффициенты динамического торможения дислокации для разных температур; критические напряжения сдвига в зависимости от расстояний между пластинами и эффективных диаметров пластин сравниваются с таковыми, полученными ранее для сферических частиц другими авторами. Найденные напряжения совпадают по порядку с предсказаниями известных теорий, но заметно отличаются и могут служить для уточнения этих теорий при изучении такого рода нанокомпозита.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение 4

1. Метод молекулярной динамики 6

1.1. Общее описание метода ……..……. 6

1.2. Краткое описание используемых подходов, реализованных в LAMMPS ……. 9

2. Скольжение дислокации в дисперсно-упрочнённом материале 14

3. Реализация метода 17

3.1. Генерация краевой дислокации ……17

3.2. Расчётная схема ……. 18

3.3. Используемые силовые поля …… 20

4. Результаты и анализ 22

4.1. Скольжение дислокации без дополнительных препятствий ……..…... 22

4.2. Скольжение дислокации с препятствием …….25

Заключение 37

Литература 38

Приложение А. Безопасность жизнедеятельности 40

ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день важной является задача создания моделей, способных предсказывать свойства новых материалов, потенциально обладающих улучшенными свойствами. Этой цели служат в том числе атомарные модели, при помощи которых можно изучать влияние различных наноразмерных структур на, в частности, зарождение и развитие пластической деформации в материале.

Пластическая деформация в большинстве случаев связана с движением в кристаллической решётке линейных дефектов — дислокаций. Движение дислокаций определяет формирование определённых структур на разных масштабных уровнях, которые могут значительно влиять на особенности деформации материала. То, насколько легко отдельная дислокация может скользить в рассматриваемом материале, может обуславливать важнейшие его свойства: предел упругости, пластичность и прочность.

Данное исследование посвящено изучению возможности упрочнения кристалла альфа-железа (α-Fe) диспергированными наноразмерными пластинами графена с использованием метода молекулярной динамики. В последние годы активно исследуются возможности улучшения механических свойств различных материалов углеродными структурами, например, различными нанотрубками. Также предпринимаются попытки исследования композитов металла и графена. К примеру, в работе [7] описывается возможность получения такого композита на основе алюминия. Похожим образом можно упрочнять сплав магния и титана [18].

При изучении пластических свойств нанокомпозитов вследствие малых характерных размеров включений важно детальное рассмотрение физических процессов в масштабе нескольких нанометров. Метод молекулярной динамики (МД) позволяет подробно рассматривать физические процессы на атомарном уровне. В том числе он активно применяется для исследования дислокационного скольжения, дополняя натурный эксперимент или являясь звеном в иерархии более сложных многомасштабных моделей. К примеру, в работе [19] показана возможность определения энтальпии активации дислокационного скольжения в МД-модели для дальнейшего использования для симуляции динамики дискретных дислокаций. В работе [2] используется двухуровневая модель для изучения поведения динамического предела текучести в алюминии.

Цель данной работы — детально изучить процесс преодоления краевой дислокацией пластинки графена. Рассматриваемая дислокация принадлежит семейству наиболее активных систем скольжения для α-Fe, имеет вектор Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$ и вектор нормали $\mathbf{n} = [\bar{1}10]$,

выраженные в кристаллографической системе координат. На рисунке 1 показана ячейка ОЦК-кристалла и ортогональная проекция атомов ячейки в плоскость векторов **b** и **n**. При такой ориентации одно из межатомных расстояний визуально представляется гораздо более коротким, чем другое, но на самом деле это не так.

Основной количественной характеристикой процесса преодоления в нашем случае является пиковое сдвиговое напряжение. Полученные напряжения могут либо использоваться для прямой оценки макроскопического предела текучести, который является одной из самых важных характеристик материала, либо могут быть использованы в более сложных и обоснованных многомасштабных моделях. Например, эти напряжения могут быть использованы в моделях дислокационной динамики, которые рассматривают движение отдельных сегментов дислокаций в сплошной среде; в таких моделях локальные пиковые напряжения для преодоления малых барьеров не могут быть найдены явно и возможно использовать данные атомарной симуляции.

Для достижения поставленной цели будем использовать пакет для многопоточных молекулярно-динамических симуляций LAMMPS [23]. Пакет LAMMPS — проект с открытым исходным кодом, реализующий передовые подходы и активно развивающийся в настоящее время. Необходимо реализовать набор сценариев для работы с пакетом, которые позволяли бы изучать скольжение одиночной дислокации в кристалле без дополнительных препятствий и с препятствием в виде круговой пластинки графена при разных диаметрах и ориентациях пластины, с разными расстояниями между пластинами.

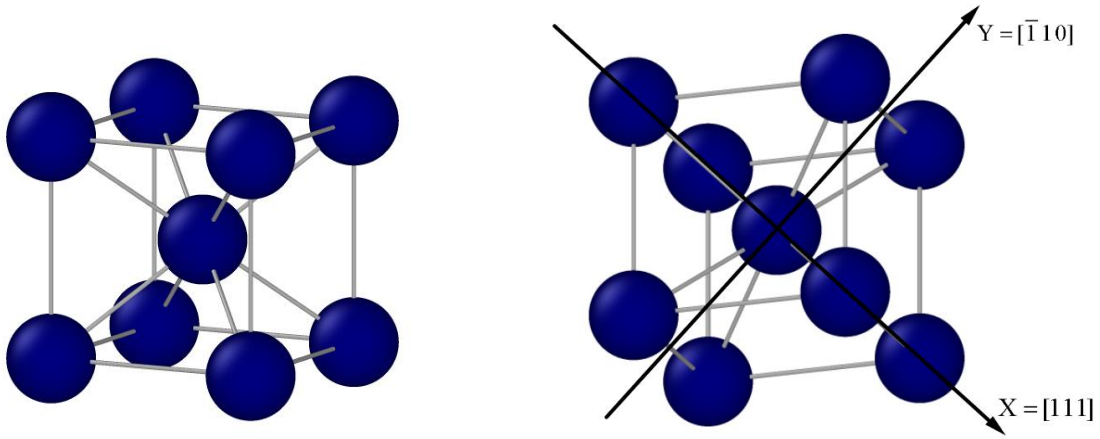

Рис. 1. Ячейка ОЦК-кристалла и её проекция в плоскость вектора Бюргерса и вектора нормали выбранной системы скольжения

1. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ СИМУЛЯЦИИ

1.1. Общее описание метода

Метод молекулярной динамики — широко используемый численный метод, использующий те или иные схемы интегрирования соотношений классической механики для точечных частиц, поле взаимодействий между которыми определено.

Метод позволяет рассматривать процессы в детализированном виде и в настоящее время зачастую заменяет или дополняет натурный эксперимент, в котором, к примеру, почти всегда невозможно рассматривать эволюцию атомарной структуры в динамическом режиме.

В структуре моделей разных масштабов метод молекулярной динамики занимает промежуточное место между первопринципными вычислениями (ab initio) и континуальными моделями. Первопринципные вычисления ограничиваются рассмотрением нескольких сотен атомов, вследствие чего позволяют рассматривать лишь небольшую область вблизи ядра дислокации. Континуальные модели эффективно используются при исследовании дислокаций. Однако, когда речь заходит о локальных взаимодействиях на атомарном уровне континуальный подход оказывается неприменимым.

Производительность современных вычислительных систем достаточна для того, чтобы воспроизводить основные свойства поля искажений дислокации, сохраняя при этом детальную атомарную структуру ядра и наноразмерных барьеров, которые могут возникать на её пути, когда она движется под действием приложенной нагрузки. Несмотря на то, что конечные размеры расчётной области влияют на полную энергию дислокации, многие свойства её структуры и характеристики локальных взаимодействий менее чувствительны к этому фактору и могут быть описаны с приемлемой точностью. Для того, чтобы убедиться в том, что размеры области не слишком малы, можно сравнивать результаты для различных размеров и выбрать такой, при котором существенного изменения результатов уже не происходит. Размеры расчётной области, как правило, ограничены возможностями вычислительной системы. В данном исследовании при выборе размеров области мы будем отталкиваться от известного опыта других авторов, работающих в этом направлении [5], [19].

Необходимость получения результата в ограниченный срок накладывает ограничения не только на количество атомов, но и на радиус обрезания силового поля. Для того, чтобы оптимизировать процессорное время, нужно стараться считать межатомные взаимодействия настолько близкодействующими, насколько это возможно. Таким образом, когда это допустимо, расчёт сил ведётся только между наиболее близкими, соседствующими атомами (ионами) в кристаллической структуре.

В настоящее время в рассматриваемой области используются различные многочастичные эмпирические потенциалы, такие как, например, потенциал погруженного атома [13]. Параметры таких потенциалов приводятся в соответствие с известными экспериментальными данными и результатами первопринципных вычислений. Сравниваются такие характеристики, как упругие постоянные, энергии точечных дефектов, фононные спектры, энергии дефектов упаковки и другие величины. Силовое поле $\mathbf{F}$ может быть получено из поля потенциала U следующим образом: $\mathbf{F} = -\nabla U$.

Общее время расчёта пропорционально количеству итераций. Методу молекулярной динамики сопутствует минимизация потенциальной энергии (а точнее разности потенциальной энергии и работы внешних сил) в отсутствие кинетической энергии частиц, так называемый метод молекулярной статики. Понятие итерации в статике и в динамике может носить разный смысл. Если в молекулярной статике под одной итерацией понимается один шаг метода минимизации, который не имеет явного физического смысла, то в динамике итерация напрямую связана с шагом по времени разностной схемы интегрирования.

На каждом шаге с временем t в динамике вычисляются ускорения атомов, согласно известному силовому полю и второму закону Ньютона ($\mathbf{F} = m\mathbf{a}$). Затем используется та или иная разностная схема, позволяющая найти координаты частиц на шаге $t + \Delta t$. Такая процедура повторяется до тех пор, пока это необходимо. Допустимое количество итераций для динамики лежит в пределах 10^7. Для корректного описания процесса шаг по времени должен быть меньше периода самой высокочастотной моды колебаний в системе, иначе характеристики колебания этой моды просто не могут быть учтены явно. В реальности же для обеспечения конвергентности системы этот шаг берётся ещё на порядок или два меньше. Для металлов следует отталкиваться от значения $\Delta t = 1\,\text{фс}$. Тогда общее физическое время расчёта находится в пределах $10\,\text{нс}$.

Каждая симуляция должна содержать как минимум четыре этапа:

1. Генерация начальной структуры
2. Релаксация (метод молекулярной статики)
3. Приведение системы к динамическому равновесию
4. Рабочая часть симуляции

Первый этап необходим по очевидным причинам. Как правило, после генерации начальной структуры положения атомов не соответствуют в точности равновесному состоянию, могут присутствовать нежелательные напряжения. Релаксация структуры в статике может быть предпочтительней динамической релаксации, так как она менее ресурсоёмка. В некоторых случаях этот этап можно бы было опустить, но так как

динамическая симуляция сама по себе длится значительно дольше, это не принесёт большого преимущества.

После того, как система приведена к равновесному состоянию в отсутствие кинетической энергии, необходимо задать некоторое начальное распределение скоростей частиц. После этого потребуется некоторое время для того, чтобы система приблизилась к динамическому равновесию. На этом этапе могут, например, быть добавлены дополнительные вязкие воздействия, позволяющие быстрее сгладить неравновесные осцилляции тех или иных величин. Затем, когда влияющие на результат начальные отклонения будут устранены, можно приступить к рабочей части симуляции.

Движение моделируемых частиц происходит в определённой области с конечными физическими размерами, которую мы будем называть расчётной областью. Во многих случаях форма этой области имеет вид прямоугольного параллелепипеда, на гранях которого применяются специальные граничные условия. К наиболее распространённым условиям относятся фиксированные, периодические и оболакивающие. Фиксированные граничные условия эквивалентны присутствию абсолютно упругой стенки и запрещают частицам покидать расчётную область. Оболакивающие условия означают, что область расширяется каждый раз, как только частица покидает её пределы, то есть количество частиц остаётся неизменным во время расчёта, но движение частиц не ограничено начальными размерами области. Наконец, периодические условия — такие условия, при которых границы расчётной области становятся проницаемыми для частиц, и топология пространства такова, что покидающая область частица возвращается в неё на противоположном конце. Таким образом, точки пространства, находящиеся вблизи двух противоположных граней, считаются близкими друг к другу, а частицы, расположенные в этих точках, могут взаимодействовать. Система с периодическим граничным условием вдоль одного из направлений эквивалентна бесконечному массиву точных копий конфигурации, получаемых параллельным переносом вдоль соответствующего направления (рисунок 2). Периодические граничные условия могут исключать нежелательные краевые эффекты, позволяя рассматриваемой модели имитировать такое состояние атомарной системы, как если бы она была частью гораздо более крупного образца. В симуляциях с дислокацией такие граничные условия также могут позволять смещаться ей не только вблизи своего начального положения, но и на большие расстояния.

Несмотря на все достоинства, метод молекулярной динамики имеет достаточно жёсткие ограничения. В первую очередь это касается временных и пространственных масштабов. В зависимости от сложности модели взаимодействия на современных вычислительных системах можно рассчитывать образцы, содержащие от нескольких сот тысяч до десятков миллионов частиц. Это значит, что пространственный предел в трёхмерной симуляции атомной

структуры металла может иметь порядок 100 нм, но не больше. Ещё более серьёзные ограничения наложены на временную шкалу, как правило, время симуляции для металла не превышает величину порядка 10 нс, что было отмечено выше. Это означает, что многие термоактивируемые процессы не могут быть рассмотрены напрямую, хотя могут существовать специальные приёмы для частичного преодоления этих ограничений, например, статический метод возмущённой упругой нити (nudged elastic band, NEB) позволяет определять энтальпию активации переходного состояния [19], которая является важной мерой при описании процессов с термической активацией.

Также проблемы возникают при определении полей взаимодействия частиц. Простые парные силовые потенциалы применимы лишь в специальных случаях и для широкого класса взаимодействий используются эмпирические многочастичные модели различной сложности. Однако, даже наиболее современные и развитые модели могут иметь несовершенства и приводить к серьёзным несоответствиям. Таким образом, в общем случае для каждой новой системы желательна тщательная проверка корректности модели взаимодействий с использованием первопринципных вычислений и известных экспериментальных данных.

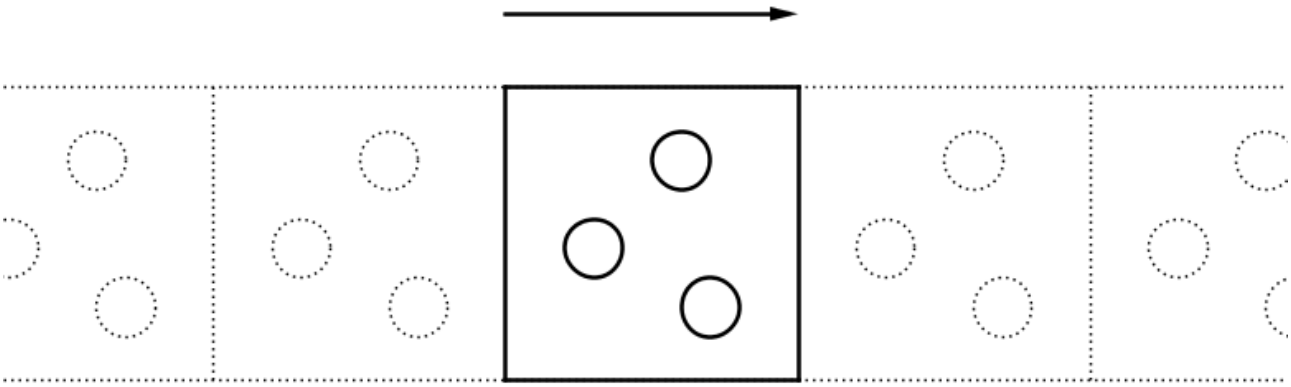

Рис. 2. Бесконечный массив равноотстоящих конфигураций вдоль периодического направления

1.2.Краткое описание используемых подходов, реализованных в LAMMPS

Перед тем, как перейти собственно к динамической части симуляции, можно осуществить релаксацию конфигурации частиц в статике, применяя метод молекулярной статики. Для минимизации энергии атомной конфигурации используется нелинейный метод сопряжённых градиентов в модификации Полака-Рибьера. Нелинейный метод сопряжённых градиентов является обобщением метода сопряжённых градиентов, который сформулирован для задачи оптимизации с линейной функцией. Метод сопряжённых градиентов широко используется в молекулярной статике, одно из его преимуществ — относительно невысокая

чувствительность к размерности задачи, что в данном контексте достаточно важно. Этот метод хорошо работает для функций, которые в окрестности локального минимума ведут себя как квадратичная функция от расстояния до экстремума.

Коротко алгоритм метода можно представить в следующем виде:

0. Сначала выполняется нулевая итерация. Выбирается начальное приближение $\mathbf{x}_0$, начальное направление линейного поиска $\mathbf{s}_0 = \mathbf{x}_0$. Затем производится линейный поиск (пункт 4).

После нулевой итерации каждая следующая итерация содержит этапы:

1. Вычисляется направление наискорейшего спуска: $\Delta\mathbf{x}_n = -\nabla f\left(\mathbf{x}_n\right)$
2. Определяется коэффициент Полака-Рибьера: $\beta_n = \dfrac{\Delta\mathbf{x}_n \cdot \left(\Delta\mathbf{x}_n - \Delta\mathbf{x}_{n-1}\right)}{\Delta\mathbf{x}_{n-1} \cdot \Delta\mathbf{x}_{n-1}}$
3. Находится сопряжённое направление: $\mathbf{s}_n = \Delta\mathbf{x}_n + \beta_n \mathbf{s}_{n-1}$
4. Производится линейный поиск вдоль сопряжённого направления, и координата $\mathbf{x}_{n+1}$ выбирается равной оптимальному значению аргумента функции в задаче $\min\limits_{\alpha} f\left(\mathbf{x}_n + \alpha\mathbf{s}_n\right)$

Для интегрирования уравнений движения используется метод Верле в скоростной форме. Аппроксимационная схема этого метода более устойчива, точнее на порядок в сравнении со схемой наиболее простого метода Эйлера и широко используется, в частности, при моделировании динамики частиц, равно как и почти идентичный метод с перешагиванием (leapfrog method).

Интегрирование заключается в последовательном повторении шагов, каждый из которых состоит из четырёх частей:

1. Вычисление скорости на середине временного шага: $\mathbf{v}\left(t + \Delta t/2\right) = \mathbf{v}\left(t\right) + \mathbf{a}\left(t\right)\Delta t/2$
2. Вычисление положения частиц на следующем шаге: $\mathbf{x}\left(t + \Delta t\right) = \mathbf{x}\left(t\right) + \mathbf{v}\left(t + \Delta t/2\right)\Delta t$
3. Определение ускорения $\mathbf{a}\left(t + \Delta t\right)$, используя обновлённые координаты $\mathbf{x}\left(t + \Delta t\right)$ и известную функцию силового поля.
4. Вычисление скоростей на следующем шаге: $\mathbf{v}\left(t + \Delta t\right) = \mathbf{v}\left(t + \Delta t/2\right) + \mathbf{a}\left(t + \Delta t\right)\Delta t/2$

Взаимодействия между частицами зачастую носят локализованный характер, поэтому имеет смысл рассчитывать силы только между частицами, которые расположены достаточно близко друг к другу. Для этого используется модифицированный метод списков Верле. Для

каждой частицы определяется список частиц, с которыми она может взаимодействовать. В отличие от оригинального метода Верле, в модифицированном методе для этого используется сеть связанных кубических ячеек (схематично на рисунке 3). При таком методе поиска отпадает необходимость рассчитывать расстояние между каждыми двумя частицами. Затем в этом заметно сокращённом списке рассчитываются расстояния до выбранной частицы, и для тех частиц, которые расположены ближе радиуса обрезания производится расчёт сил. Естественно, окрестность из вышеупомянутых кубических ячеек должна полностью включать шар радиуса обрезания.

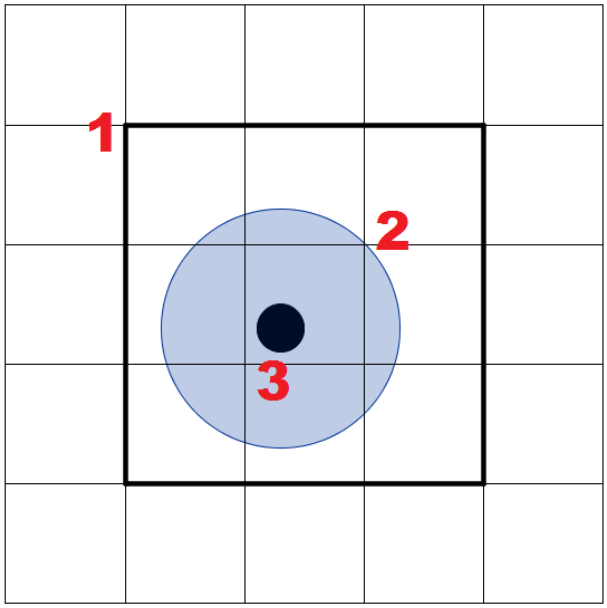

Рис. 3. Визуальное представление схемы модифицированного метода списков Верле. (1) граница списка возможных соседей, (2) шар радиуса обрезания, (3) частица.

Как при приведении системы к динамическому равновесию, так и в рабочей части симуляции важно следить за такими параметрами системы, как температура и давление. Температура — мера средней кинетической энергии частиц; она вычисляется следующим образом:

$$T = \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i V_i^2}{3k} \Big/ N \,, \qquad (1.2.1)$$

N — количество частиц, m_i и V_i — масса и скорость частицы с номером i, k — постоянная Больцмана.

Компоненты тензора напряжений определяются при помощи известного вириального соотношения:

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{\Omega}\sum_k \left(-m^{(k)} \left(u_i^{(k)} - \bar{u}_i \right) \left(u_j^{(k)} - \bar{u}_j \right) + \frac{1}{2}\sum_l \left(x_i^{(l)} - x_i^{(k)} \right) f_j^{(kl)} \right), \qquad (1.2.2)$$

здесь Ω — объём области, индексы k и l обозначают номера атомов, m — масса соответствующего атома, u_i — компонента скорости, $\bar{u}_i$ — компонента средней скорости, x_i — координата атома, $f_i^{(kl)}$ — сила, действующая со стороны атома l на атом k. Первая часть суммы представляет собой динамическую часть напряжений; если атомы не взаимодействуют, то это есть давление идеального газа. Вторая часть — статическая, связана с межатомными взаимодействиями.

Как правило, к началу рабочей части симуляции распределение скоростей частиц и их положений должно быть близко к равновесному распределению при определённой температуре. Само же равновесное распределение может зависеть от внутренней структуры, граничных условий, законов взаимодействий и других факторов. Поэтому, вместо того, чтобы задавать его априорно, принято предоставлять системе некоторое время, чтобы она приблизилась к динамическому равновесию. После использования метода молекулярной статики начальные скорости задаются в соответствии с распределением Максвелла для некоторой температуры. Стоит учесть, что в динамической системе происходит постоянный обмен кинетической энергии и энергии взаимодействий, поэтому после добавления кинетической энергии в систему часть этой энергии достаточно быстро распределится в среднюю энергию взаимодействий, температура понизится.

Из-за изменения внутренней структуры или каких-либо искусственных эффектов температура может значительным образом изменяться. Для того, чтобы предотвратить это, когда это нежелательно, используются специальные термостатирующие приёмы. В нашем случае используется метод Нозе-Гувера [14]. В этом случае система дополняется тепловым резервуаром, с которым возможен теплообмен, добавляется вязкая сила трения. Сила трения пропорциональна произведению скорости частицы на коэффициент трения ξ, а производная по времени от ξ вычисляется как разность между текущей кинетической энергией и энергией, соответствующей исходной температуре [4].

Напряжённое состояние системы может тем или иным образом влиять на результат. Довольно часто в симуляции предполагается специальный вид напряжённого состояния: разгруженное состояние, одноосное нагружение, сдвиговое нагружение, всестороннее сжатие и другие. Это значит, что ненулевыми должны быть лишь некоторые компоненты тензора напряжений. В реальной симуляции добиться этого в абсолютной мере невозможно. Если

вдоль некоторого направления действуют периодические граничные условия, то соответствующая компонента напряжений может не просто совершать неустранимые малые осцилляции, но в среднем значительно отличаться от желаемого значения из-за того, что фиксированный размер области делает атомную конфигурацию несколько “стеснённой”. В этом случае можно сделать размер расчётной области переменным, а координаты атомов масштабировать для имитации равномерного растяжения/сжатия. Этот приём используется в динамике для поддержания заданного напряжения (баростатирование). Контролировать можно также и сдвиговые компоненты тензора напряжений, позволяя расчётной области иметь деформацию сдвига.

Для баростатирования используется метод Парринелло-Рамана [17]. В этом баростате векторы периодической области моделирования $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ представлены в виде матрицы $\mathbf{h} = \{\mathbf{a} \quad \mathbf{b} \quad \mathbf{c}\}$, подчиняющейся уравнениям движения:

$$\ddot{\mathbf{h}} = \Omega \cdot \mathbf{W}^{-1} \cdot \left(\mathbf{S} - \mathbf{S}_0\right) \cdot \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{h}}, \tag{1.2.3}$$

где V — объём ячейки, а $\mathbf{W}$ — матрица коэффициентов, определяющих скорость баростатирования и возможную деформацию расчётной ячейки, а $\mathbf{S}$ и $\mathbf{S}_0$ — текущий тензор напряжений и шаровой тензор внешнего гидростатического давления соответственно. Баростат Парринелло-Рамана может быть использован совместно с термостатом Нозе-Гувера для проведения расчётов с одновременным контролем напряжений и температур [4].

Указанные выше приёмы баростатирования и термостатирования описаны в максимально упрощённой форме, в действительности же используются достаточно развитые модификации этих методов, полное описание которых содержится в [12], [20].

2. СКОЛЬЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В ДИСПЕРСНО-УПРОЧНЁННОМ МАТЕРИАЛЕ

Существуют принципиально разные механизмы преодоления барьера-включения краевой дислокацией. Дислокация может перерезать частицу, когда сдвиг происходит как в основной матрице, так и в самом включении. Дислокация может обходить барьер за счёт переползания, имеющего диффузионную кинетику. Наконец, дислокация может огибать барьер не покидая плоскость своего скольжения и не перерезая её, если частица достаточно прочная, — так называемый механизм огибания Орована [10].

При быстром движении дислокации механизм переползания не оказывает заметного влияния, так как имея диффузионную природу протекает достаточно медленно. В нашем исследовании вследствие того, что связи между атомами углерода в пластине графена достаточно сильны, разрыв связей не происходит, и процесс оказывается близок в своих чертах к процессу огибания Орована.

Впервые задача нахождения критического напряжения скольжения для материала с распределёнными неперерезаемыми частицами, находящимися в плоскости скольжения, была рассмотрена Орованом. Для описания возникающих при предельном натяжении дислокационной дуги напряжений (рисунок 4), используя представление дислокации как упругой нити, он предложил простое соотношение:

$$\tau = \frac{Gb}{L}, \tag{2.1}$$

G — модуль сдвига, b — модуль вектора Бюргерса, L — расстояние между частицами, τ — дополнительное сдвиговое напряжение, необходимое для преодоления массива частиц дислокацией.

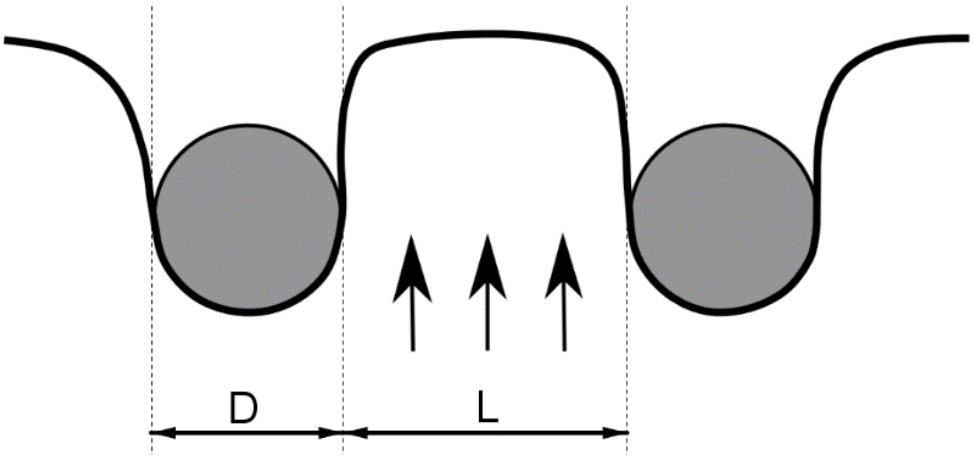

Рис. 4. Предельное положение дислокационной дуги при огибании неперерезаемых частиц

Модель дислокации как упругой нити имеет серьёзный изъян: она не учитывает дальнодействующие поля дислокации, которые могут обуславливать взаимодействие сегментов дислокации между собой. В действительности такой эффект имеет место быть и заметно влияет на результат в том числе и этой задачи. Для учёта дальнодействия и статистического распределения частиц соотношение Орована было модифицировано Эшби [10]:

$$\tau = 0.84\frac{1.2Gb}{2\pi L}\ln\left(\frac{D}{r_0}\right), \tag{2.2}$$

D — диаметр частицы, r_0 — радиус ядра дислокации. Эта связь ныне часто применяется в случаях, когда речь идёт о дисперсионном упрочнении, и широко известна как соотношение Эшби-Орована.

В работе [6] предложена ещё одна модификация соотношения Орована для периодического массива частиц одинакового диаметра:

$$\boxed{\tau = \frac{Gb}{L}A\left(\ln\frac{\bar{D}}{r_0} + B\right)}, \tag{2.3}$$

где $A = \frac{1}{2\pi}$ для краевой дислокации, $B = 0.7$, $\bar{D} = \left(D^{-1} + L^{-1}\right)^{-1} = \frac{DL}{D+L}$, r_0 — радиус ядра дислокации, часто полагающийся $r_0 = 2b$. Это соотношение описывает известные асимптотические случаи: $\frac{D}{L} << 1$ ($\bar{D} \approx D$) и $\frac{D}{L} >> 1$ ($\bar{D} \approx L$), и предлагает оценку для промежуточных случаев, когда эти величины сравнимы. В работе приведены результаты расчёта, в котором дуги дислокации представляются набором прямолинейных сегментов, приводится численное обоснование выбора меры $\bar{D}$. Далее мы будем называть это соотношение моделью BKS, согласно первым буквам фамилий авторов (Bacon, Kocks, Scattergood).

Исходя из того, что размеры расчётной области вдоль линии дислокации в нашем исследовании ограничены пределами 8 нм – 20 нм, а размеры пластины 1 нм – 8 нм, это соотношение лучше других подходит для оценки добавочных напряжений в случае огибания, так как в большинстве случаев мы имеем дело со сравнимыми величинами D и L и не можем ограничиваться асимптотическими случаями. Помимо этого, постановка этой задачи с периодическим массивом барьеров близка к той, которой мы зададимся далее.

Несмотря на то, что соотношение (2.3) сформулировано для сферической частицы в изотропном материале и его, возможно, можно несколько улучшить для описания нашего случая, представляется, что в этом нет необходимости потому, что в любом случае

затруднительно учесть все факторы, оказывающие влияние на упрочнение, не прибегая к численным методикам. В числе таких факторов и влияние пластины на поле дислокации, и анизотропия, прочность связей железо-углерод, прирост упругой энергии за счёт изгиба пластины. Вместо этого мы прибегнем к численным расчётам метода молекулярной динамики.

3. РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА

3.1. Генерация краевой дислокации

Для того, чтобы задать атомную конфигурацию в симуляции с дислокацией, выполняются следующие четыре шага:

1) Генерация и релаксация идеального кристалла
2) Удаление полупластины шириной вектора Бюргерса
3) Сближение границ разреза
4) Релаксация

Визуальное представление этих шагов изображено на рисунке 5.

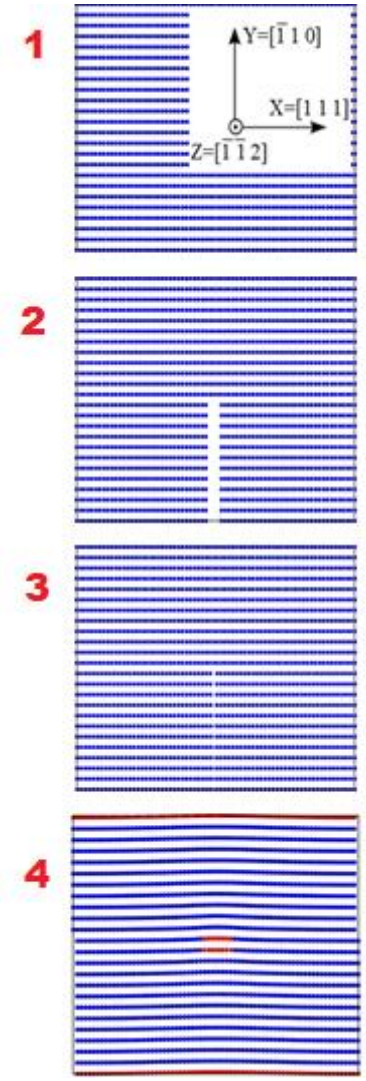

Рис. 5. Генерация дислокации.
(1) идеальный кристалл,
(2) вырез,
(3) сближение границ выреза,
(4) релаксация ядра

Сближение границ разреза производится равномерным растяжением каждой атомной полуплоскости таким образом, чтобы вдали от ядра локальная конфигурация была близка к идеальной, а вблизи к ядру оставалось заметное несоответствие. После сближения также задаётся малая деформация сжатия области (длина вдоль оси x, l_x, уменьшается на величину $b/2$), после этого массовая плотность становится равна начальной, а среднее сжатие в области выше выреза равно среднему растяжению в области уровня выреза. Представляется, что такая конфигурация ближе к равновесной.

Под релаксацией понимается достижение конфигурацией ненагруженного состояния, соответствующего минимуму потенциальной энергии взаимодействий. Релаксация атомной конфигурации должна включать в себя также оптимизацию размеров области вдоль периодических направлений для достижения ненагруженного состояния. Для этого была реализована итеративная процедура с чередованием процессов оптимизации размеров и минимизации энергии методом сопряжённых градиентов, которая сходится за несколько десятков итераций.

3.2. Расчётная схема

Для достижения поставленных целей мы должны реализовать такую расчётную схему, которая бы позволяла верно описывать поведение дислокации при больших смещениях относительно начального положения. Важно иметь возможность контролировать как скорость сдвига (то есть деформацию), так и внешнюю сдвиговую нагрузку. Модель, позволяющая выполнить эти условия, — модель периодического массива дислокаций [9]. Вдоль линии дислокации и вдоль направления её скольжения применяются периодические граничные условия. Это значит, что симулируется поведение бесконечно протяжённых дислокаций, отстоящих друг от друга на фиксированном расстоянии. В то время как задание периодических условий вдоль оси дислокации выглядит абсолютно оправданным, периодичность вдоль направления скольжения привносит некоторые искусственные эффекты, например, бесконечный периодический массив дислокаций изменяет распределение напряжений в области. Но в работе [5] отмечается, что эти эффекты имеют свойство убывать вместе с размерами области, а модель периодического массива дислокаций при условии корректного выбора размера области позволяет для скольжения дислокаций получать не только качественный, но и верный количественный результат.

В нашем исследовании расчётная область представляет из себя прямоугольный параллелепипед с физическими размерами $l_x \times l_y \times l_z$. Внутри области расположен монокристалл железа ориентированный так, что оси расчётной области выражаются в кристаллографической системе координат таким образом, как отмечено на рисунке 6.

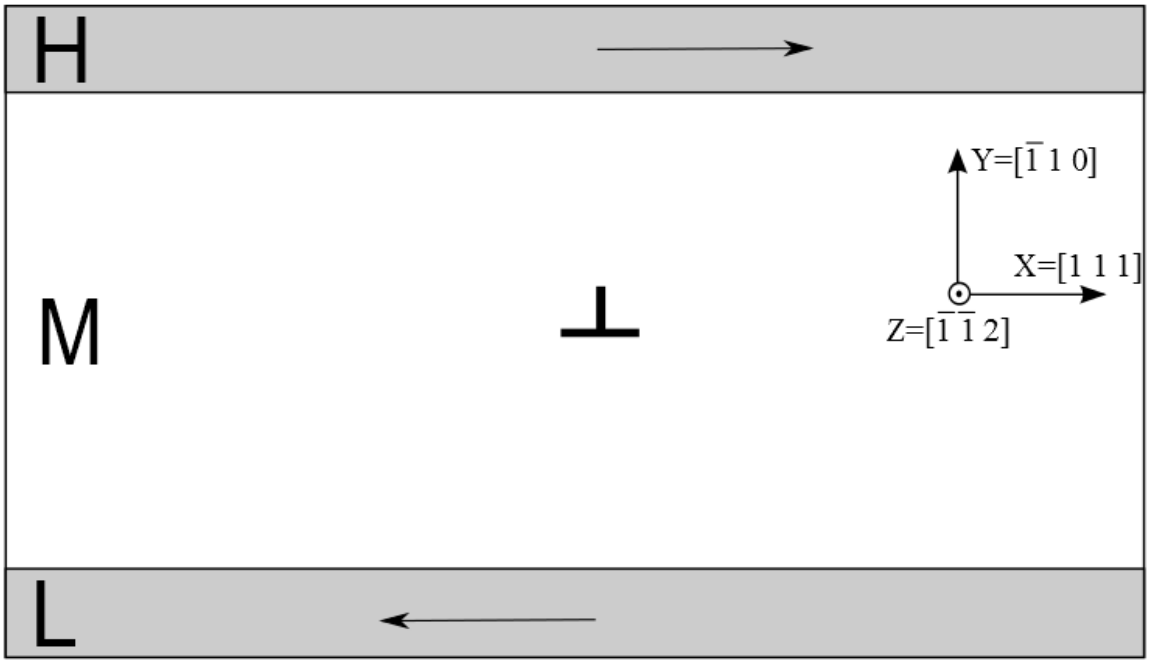

Рис. 6. Схема расчётной области

Монокристалл содержит краевую дислокацию с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$ и вектором нормали $\mathbf{n} = [\bar{1}10]$, которые соответствуют наиболее активной системе скольжения для альфа-железа. Процедура генерации дислокации была продемонстрирована выше. Выделяются две области: L и H, содержащие по три приграничных атомных плоскости (ширина приграничного слоя должна быть больше радиуса обрезания потенциала для исключения граничных эффектов во внутренней области). Накладывая определённые связи на атомы в этих областях, можно контролировать деформацию.

В направлении оси Z (то есть в направлении линии дислокации) и оси X применяются периодические граничные условия. В направлении оси Y граничные условия полагаются свободными в том смысле, что мы не будем жёстко контролировать движение атомов в этих областях, но всё же будем прикладывать к ним дополнительные равномерно распределённые силы. В отличие от подхода с жёсткой фиксацией приграничных рядов атомов [15], такой подход позволяет избежать некоторых искусственных эффектов, например, действия дополнительной периодической силы на дислокацию [19].

Относительный сдвиг и сдвиговая нагрузка определяются координатами центров масс областей L (x_L , y_L) и H (x_H , y_H) и проекциями на ось x результирующих приложенных сил F_L и F_H , действующих на них, соответственно. Относительный сдвиг задаётся соотношением:

$$\gamma = \frac{x_H - x_L}{y_H - y_L}, \tag{3.2.1}$$

а сдвиговая нагрузка:

$$\sigma = \frac{F_H - F_L}{2\,S}, \tag{3.2.2}$$

где $S = l_x \times l_z$.

Рассматриваются два способа задания деформации: с приложением постоянной сдвиговой нагрузки и с постоянной скоростью сдвига. Так как ни та ни другая схема никогда не реализуется в реальном процессе, отдать предпочтение одной из них априори сложно.

Для контроля сдвиговых напряжений можно добавить силы вдоль оси X, равномерно распределённые по атомам в приграничных областях L и H. При этом удобно использовать такие силы, чтобы их результирующие были равны по модулю и противоположны: $\mathbf{F}_H = -\mathbf{F}_L$. Тогда приложенная нагрузка $\sigma = \frac{F_H}{S} = -\frac{F_L}{S}$.

Для контроля постоянной скорости относительного сдвига можно добавить такие равномерно распределённые по L и H силы, которые бы компенсировали силы, действующие на центры масс этих областей. После этого центры масс будут двигаться равномерно, их скорость мы можем задать в начале симуляции. В этом случае приложенная нагрузка определяется также выражением (3.2.2).

3.3. Используемые силовые поля

Прежде, чем перейти собственно к расчёту, необходимо определить силовые поля для всех типов взаимодействий. В нашем контексте мы будем рассматривать три типа взаимодействий: железо-железо (Fe-Fe), углерод-углерод (C-C), железо углерод (Fe-C).

Для перового типа взаимодействия (Fe-Fe) используется модель погруженного атома. Эта модель взаимодействия будет оказывать решающее влияние на результат исследования, так как определяет структуру ядра дислокации, её энергию в различных конфигурациях. Описание и подробное изучение свойств реализации этого потенциала для железа приведено в [13], параметризация позже была улучшена автором и в своём текущем состоянии приведена в [24].

Если эмпирические параметры потенциала приводятся в соответствие только с данными идеальных структур, то в результате можно ожидать, что они будут хорошо описывать конфигурации атомов, обладающие соответствующей симметрией, и в которых межатомное расстояние близко к равновесному. Поэтому такие параметризации должны обладать ограниченной применимостью и не подходят для описания различного рода дефектов: вакансий, примесных атомов, межзеренных границ и дислокаций. Потенциал, подходящий для описания дислокационного скольжения должен быть параметризован с особенной тщательностью. Как минимум, важно точное воспроизведение энергии дефекта упаковки, которая влияет на возможность и ширину расщепления краевой дислокации на две частичные. В указанной выше работе была проведена подобная тщательная параметризация. Стоит отметить, что этот потенциал один из немногих способен корректно описывать строение ядра винтовой дислокации в альфа-железе [8].

Потенциальная энергия в модели погруженного атома состоит из двух частей: энергия парных взаимодействий и функция погружения,

$$U = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N} \varphi\left(r_{ij}\right) + \sum_{i=1}^{N} \Phi\left(\rho_i\right), \tag{3.3.1}$$

здесь N — количество атомов, r_{ij} — расстояние между атомами с номерами i и j, φ — энергия парного взаимодействия, ρ_i — суммарная электронная плотность в окрестности

частицы с номером i, Ф — функция погружения. Предполагается, что каждый атом из близких к определённому вносит вклад в локальную электронную плотность:

$$\rho_i = \sum_j \psi\left(r_{ij}\right), \tag{3.3.2}$$

и от общей электронной плотности зависит энергия погружения. Для параметризации потенциала выбирается та или иная система базисных функций и рассматриваются разложения:

$$\varphi(r) = \sum_{k=1}^{n^{\varphi}} a_k^{\varphi} \varphi_k(r), \tag{3.3.3}$$

$$\psi(r) = \sum_{k=1}^{n^{\psi}} a_k^{\psi} \psi_k(r), \tag{3.3.4}$$

$$\Phi(\rho) = \sum_{k=1}^{n^{\Phi}} a_k^{\Phi} \Phi_k(\rho). \tag{3.3.5}$$

a_k^{φ}, a_k^{ψ} и a_k^{Φ} — наборы неизвестных параметров, которые находятся решением задачи минимизации невязки.

Взаимодействие углерод-углерод ($C-C$) описывается одной из наиболее развитых моделей для описания различных углеродных структур — модели AIREBO, сформулированной в [21]. Модель взаимодействия для этого типа связи должна оказывать ограниченное (малое) влияние на результат, при условии, что она в целом подходит для описания графена. Из-за малой доли атомов углерода в рассматриваемом образце использование более простых моделей не принесёт существенного ускорения расчёта.

Связь $Fe-C$ при взаимодействии железа с графеном, вслед за авторами [22], будем описывать при помощи потенциала Леннарда-Джонса:

$$U = 4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right) \tag{3.3.6}$$

с параметрами $\varepsilon = 0.09463\,\text{эВ}$, $\sigma = 0.205\,\text{нм}$. Параметры потенциала определяются согласованием с данными первопринципных вычислений.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И АНАЛИЗ

4.1. Скольжение дислокации без дополнительных препятствий

Динамика движения дислокации бывает по крайней мере двух типов: термоактивационное движение и быстрое скольжение. При умеренных и низких температурах дислокационное скольжение может поддерживаться за счёт термической активации, небольшие участки дислокации могут выбрасываться в направлении скольжения под действием тепловых флуктуаций. Если дислокации движутся в таком режиме, то с увеличением температуры энергия флуктуаций растёт, а необходимое напряжение для активного скольжения уменьшается, то есть уменьшается предел текучести.

Если дислокация движется достаточно быстро, то термическая флуктуация уже не контролирует скольжение, так как частота активации оказывается недостаточно высокой для того, чтобы вносить заметный вклад. При быстром скольжении дислокации её скорость лимитируется перекачкой энергии в колебания ионов или электронной подсистемы. В отличие от области термофлуктуационной подвижности, скорость дислокаций в динамической области падает с температурой в соответствии с увеличением плотности газа элементарных возбуждений. Поэтому при очень высоких скоростях деформирования для некоторых материалов наблюдается возрастание напряжения течения с увеличением температуры.

В силу малых допустимых времён симуляции метод молекулярной динамики ограничивается рассмотрением быстрого движения дислокации, при котором происходит активная перекачка энергии в колебания кристаллической решётки — так называемое фононное трение [1]. Такой режим может быть характерен при ударном нагружении, или в таком материале, в котором есть сильные барьеры для скольжения, блокирующие дислокацию на относительно большое время; после отрыва от барьера дислокация может двигаться очень быстро до того момента, пока не встретит следующее препятствие.

Основное влияние на характеристики скольжения дислокации в конечном итоге оказывает природа межатомных взаимодействий, так как она определяет структуру ядра дислокации. Следует учитывать тот факт, что краевая дислокация в некоторых материалах может расщепляться на две частичные дислокации. В таких случаях этап приведения к динамическому равновесию в симуляции должен быть проведён с особым вниманием и должен быть, возможно, несколько длиннее, чем в ином случае (до нескольких наносекунд), так как для расщепления дислокации необходимо некоторое время. В нашем случае дислокация не расщепляется, её ядро сохраняет компактную структуру.

Была проведена серия симуляций с размерами расчётной области $14.7 \times 12.0 \times 8.4$ нм при температурах $200\ \mathrm{K}, 300\ \mathrm{K}, 400\ \mathrm{K}, 500\ \mathrm{K}$. Получены зависимости скорости движения

дислокации от приложенного сдвигового напряжения в области быстрого движения дислокации, при котором основной вклад в сопротивление скольжению вносит фононное трение. Для этого была реализована схема с контролем сдвиговых напряжений. После приложения сдвиговой нагрузки дислокация разгоняется и достаточно быстро начинает двигаться с установившейся скоростью. Под скоростью движения дислокации мы будем понимать установившуюся скорость скольжения.

Вплоть до скорости, равной приблизительно половине предельной скорости, связь хорошо описывается известным линейным соотношением [16] (рисунок 7):

$$\sigma b = B_0(T) \cdot V \,. \tag{4.1.1}$$

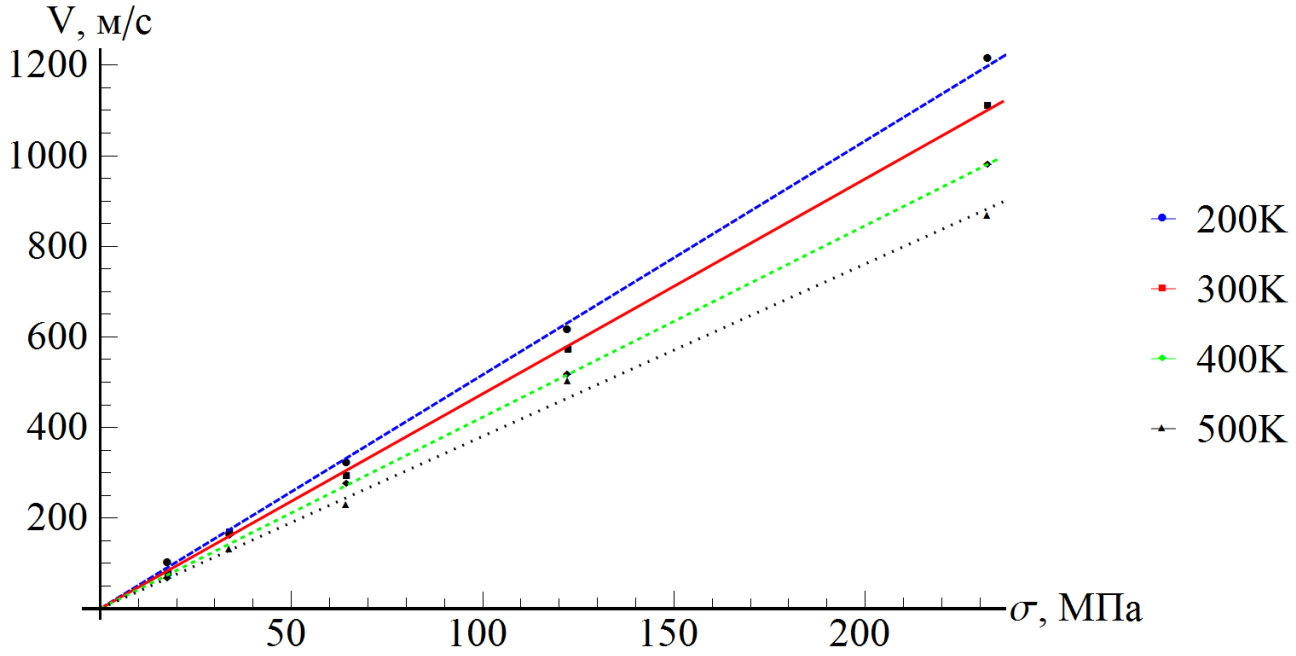

Рис. 7. Линейный участок зависимости установившейся скорости дислокации от напряжений

При дальнейшем увеличении напряжений зависимость приобретает нелинейный характер с выходом на предельные скорости в диапазоне 2000-2300 м/с (рисунок 8), сравнимые с предельной скоростью поперечных волн (около 3000 м/с). Зависимость коэффициентов динамического торможения B_0 (обращённые коэффициенты наклона прямых $V(\sigma)$) от температуры качественно соответствует известному феномену, согласно которому эти коэффициенты должны возрастать вместе с температурой.

Для описания движения дислокации при скоростях, близких к предельной, могут использоваться, к примеру, псевдорелятивистские модели зависимости коэффициента динамического торможения [3]:

$$B(V,T)=\frac{B_0(T)}{\left(1-(V/c_0)^2\right)^n}. \qquad (4.1.2)$$

Неизвестные константы в подобных моделях можно определять, приводя модели в соответствие с предсказаниями молекулярной динамики. В данной работе для описания нелинейного участка зависимости скорость-напряжение использовалась аппроксимация

$$\sigma=\frac{B_d(T)\cdot(V-V_0)}{\left(1-(V/c)^4\right)^{0.5}}+B_0(T)\cdot V_0, \qquad (4.1.3)$$

где значение $B_0(V_0)$ должно совпадать со значением на линейном участке, V_0 — условная граница смены режима, B_d и c — параметры аппроксимации.

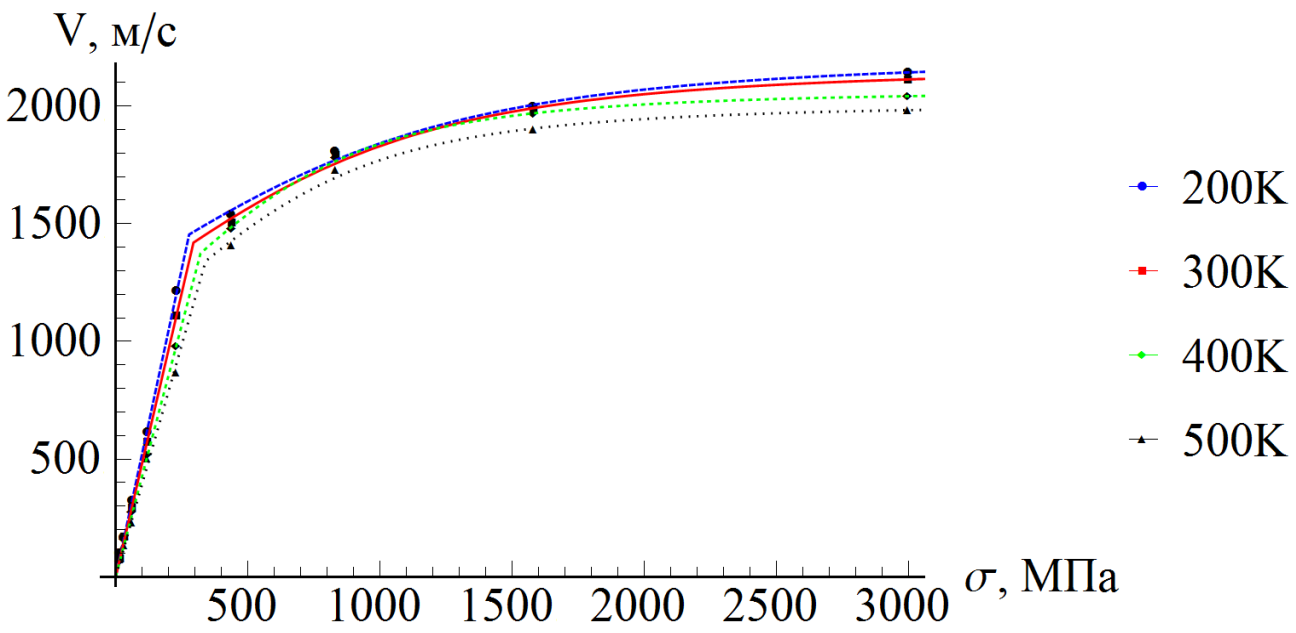

Рис. 8. Скорость движения дислокации в широком диапазоне напряжений.

В таблице 1 представлены расчётные значения коэффициентов динамического торможения для линейного участка скоростной зависимости и предельные скорости скольжения дислокации.

Таблица 1

T, K	B_0/b, МПа×с/м	c, м/с
200	0.191	2209
300	0.207	2166
400	0.233	2068
500	0.254	2011

4.2. Скольжение дислокации с препятствием

Для изучения скольжения дислокации, преодолевающей барьер, была реализована схема с контролем сдвиговых деформаций. В начале симуляции задаётся такая скорость сдвига, которая может возникать при движении прямолинейной краевой дислокации со скоростью $v = 100$ м/с. Согласно известному соотношению Орована для скорости относительного сдвига, она равна

$$\dot{\gamma} = \rho b v, \tag{4.2.1}$$

где $\rho = \dfrac{l_z}{l_x \times (y_H - y_L) \times l_z} = \dfrac{1}{l_x \times (y_H - y_L)}$ — дислокационная плотность. Стоит отметить, что объективной скоростной характеристикой процесса в рассматриваемом случае является именно скорость дислокации, а не скорость сдвига, которая очевидным образом будет зависеть от размеров области при прочих равных условиях.

Также для скорости сдвига верно

$$\dot{\gamma} = \frac{v_{LH}}{y_H - y_L}, \tag{4.2.2}$$

где v_{LH} — скорость движения центра масс области H относительно центра масс области L. Тогда скорость каждой из областей по модулю равна

$$\frac{v_{LH}}{2} = \frac{bv}{2l_x}, \tag{4.2.3}$$

но они противоположны по направлению, именно такую скорость для центров масс областей мы зададим в начале рабочей части симуляции.

Вклад механизма фононного трения в общие напряжения должен оцениваться величиной 20 МПа, исходя из полученных ранее скоростных зависимостей. Поэтому

возможно рассматривать этот эффект несколько упрощённо ввиду того, что его вклад в общие напряжения (от 300 МПа и выше) невелик. Полученные скоростные зависимости движения дислокации позволяют оценить оптимальную скорость деформации, что важно, так как слишком малая скорость будет приводить к неоправданно долгим временам симуляции, а слишком большая - к сильному влиянию эффекта фононного трения.

На рисунке 9 представлены кривые деформации для одной и той же системы, но с разными скоростями сдвига. Видно, что при увеличении скорости пиковые напряжения значительно возрастают, что ещё раз показывает важность выбора приемлемой скорости деформации. Возрастание напряжений объясняется тем, что при отрыве от барьера скорость дислокации должна сильно меняться и это не может произойти мгновенно из-за сил вязкого трения. Отрыв дислокации получается растянутым во времени, и упругая энергия продолжает накапливаться.

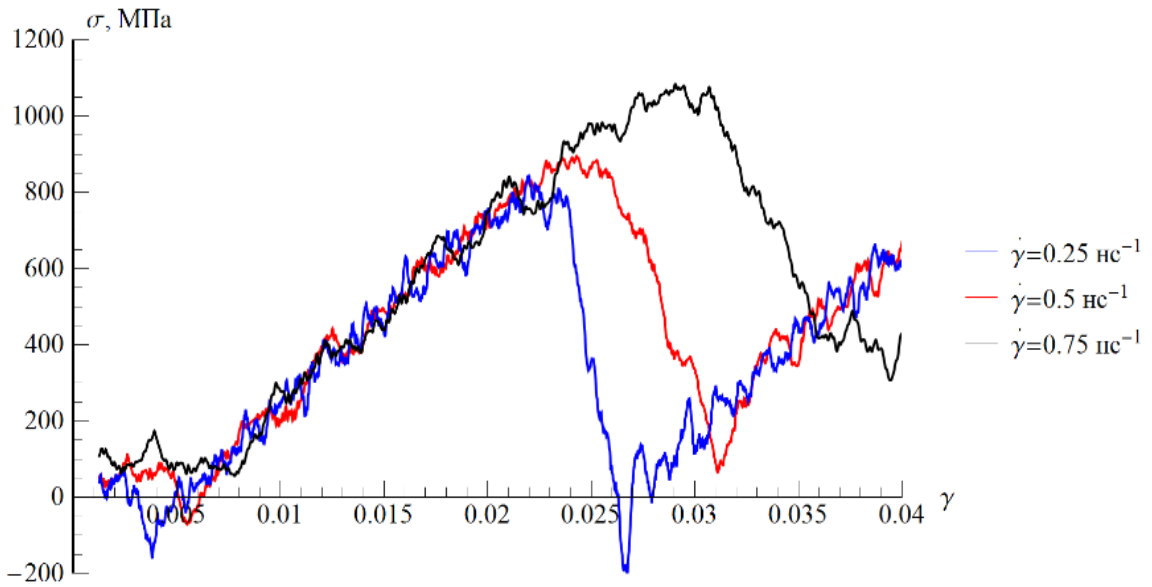

Рис. 9. Кривые деформации при различных скоростях сдвига

Была реализована серия симуляций с разными размерами расчётной области, разными диаметрами и ориентациями круговых пластин при умеренной температуре $T = 300\ \mathrm{K}$. Для сравнения с теоретической оценкой модели BKS, предложенной, вообще говоря, для сферических неперерезаемых частиц, будем рассматривать понятие эффективного диаметра барьера

$$D = W\cos(\alpha). \tag{4.2.4}$$

Здесь W — ширина пластины, угол α определяет ориентацию пластины в плоскости xz (схема на рисунке 10). Угол α не задаёт ориентацию пластины однозначно, так как пластина

может иметь наклон к плоскости скольжения. Для однозначного определения ориентации введём в рассмотрение также угол между плоскостью скольжения и нормалью пластины и обозначим его β. Если пластина расположена перпендикулярно плоскости скольжения, то $\beta = 0$, а при $\beta = \frac{\pi}{2}$ пластина лежит в плоскости скольжения.

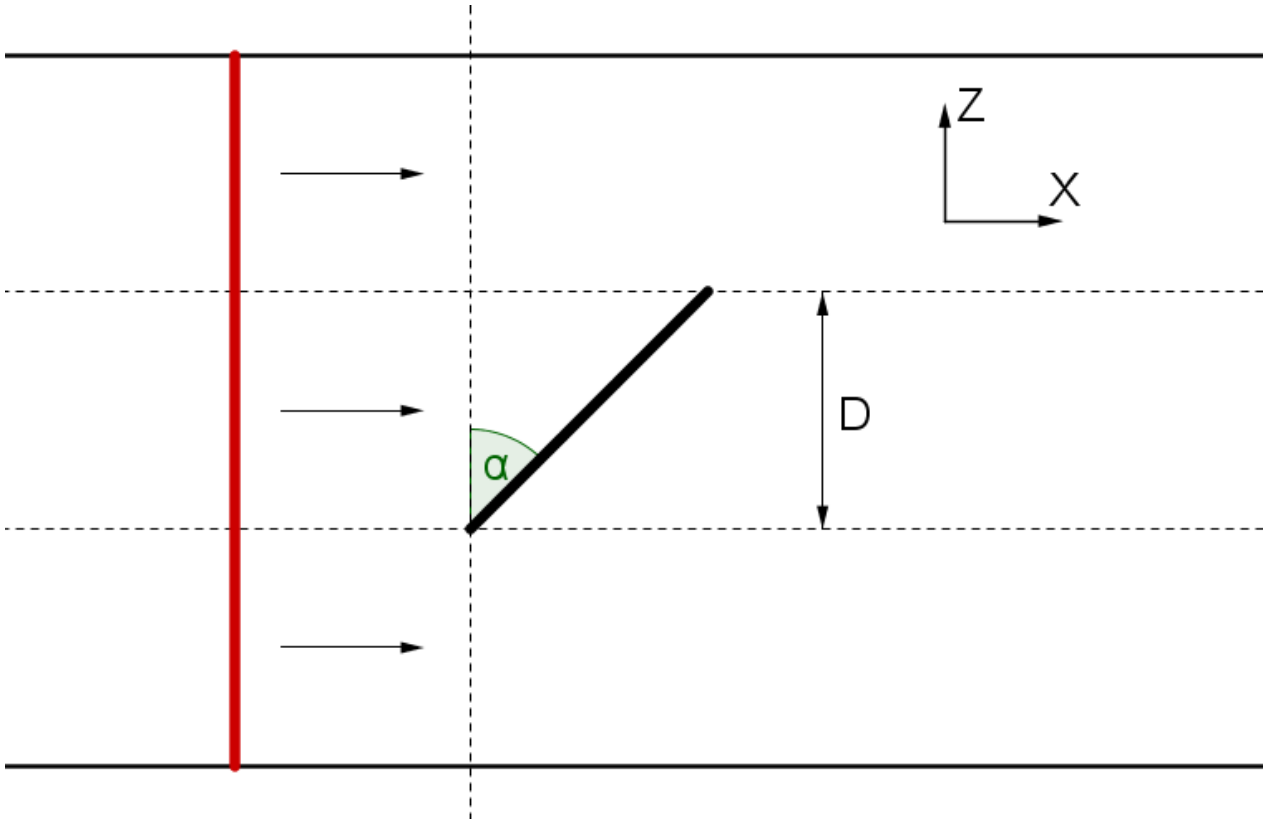

Рис. 10. Схематичное представление конфигурации в плоскости скольжения

Вследствие того, что в направлении линии дислокации применяются периодические граничные условия, происходит имитация преодоления бесконечного массива равноотстоящих барьеров бесконечно протяжённой дислокацией, то есть постановка близка к постановке в модели BKS.

Пластина графена остаётся неперерезаемой (то есть не происходит разрыва связей углерод-углерод) при любом характерном размере, но после прохождения дислокации приобретает изгиб (рисунок 11), что также может вносить дополнительный вклад в упрочнение. При огибании неперерезаемой частицы по механизму Орована вокруг неё образуется дислокационное кольцо вследствие того, что дислокация в кристалле не может обрываться. В нашем случае дислокационное кольцо вокруг включения не образуется, это роднит рассматриваемый процесс с процессом перерезанием частиц. Но, несмотря на это, предельное устойчивое состояние системы в большинстве случаев близко к таковому в классической схеме Орована, продемонстрированной во второй главе. Поэтому в качестве

теоретической оценки можно использовать ранее рассмотренные соотношения. На рисунке 12 изображена характерная последовательность состояний при преодолении дислокацией препятствия.

Для процесса преодоления пластинок характерны три различных режима (рисунок 13), характеризующиеся тремя типами предельных состояний конфигурации. При малых $\alpha \approx 0$, когда эффективный диаметр самый большой при фиксированной ширине пластины, критическое положение характеризуется двумя вытянутыми винтовыми участками дислокации, которые после потери устойчивости системы начинают сближаться навстречу друг другу, затем при встрече аннигилируют. Стоит отметить, что для этих достаточно длинных винтовых участков может быть характерно непланарное скольжение (рисунок 14).

При широком диапазоне углов мы имеем несимметричное предельное состояние, при котором один винтовой участок заметно длиннее другого. После достижения критического напряжения этот винтовой участок становится подвижен и сближается с более коротким.

Особым случаем является случай с поперечной ориентацией пластины $\alpha \approx \frac{\pi}{2}$. Здесь более важную роль должен играть не эффективный диаметр, который оказывается достаточно мал, а прочность связей железо-углерод, контролирующая сдвиг. Этот случай более близок по своим особенностям к случаю с работой механизма перерезания сферических частиц.

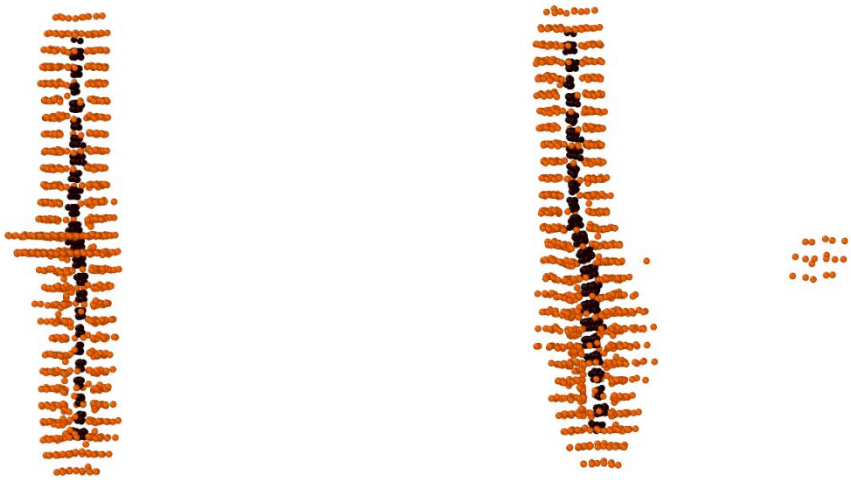

Рис. 11. Пластина графена, окружённая атомами железа, до и после прохождения дислокации

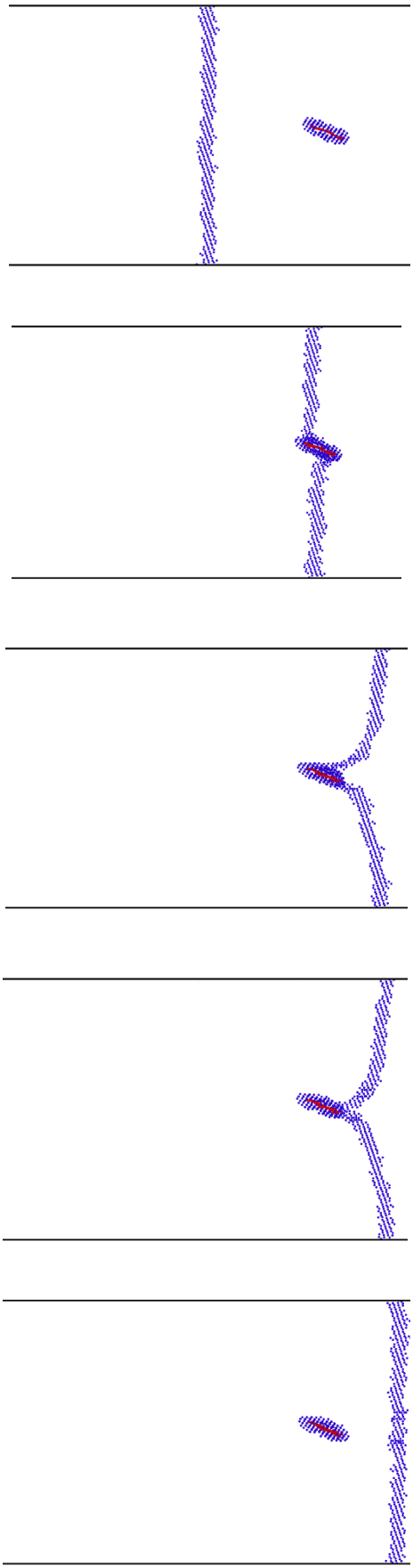

Рис. 12. Этапы преодоления барьера дислокацией. Сверху-вниз: 1) дислокация до барьера, 2) встретившая барьер дислокация, 3) критическое положение, 4) момент отрыва, 5) дислокация после прохождения барьера.

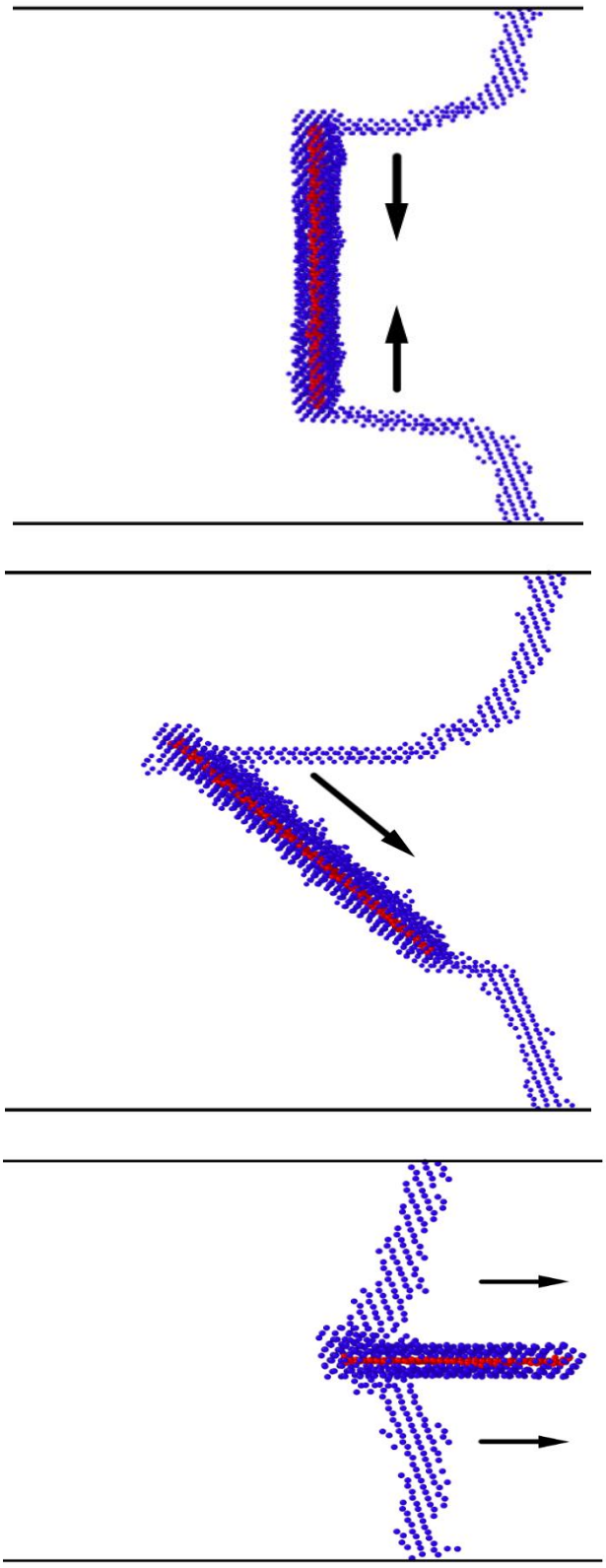

Рис. 13. Три типа предельных состояний при различных углах α. Стрелки указывают направление смещения дислокации после потери устойчивости.

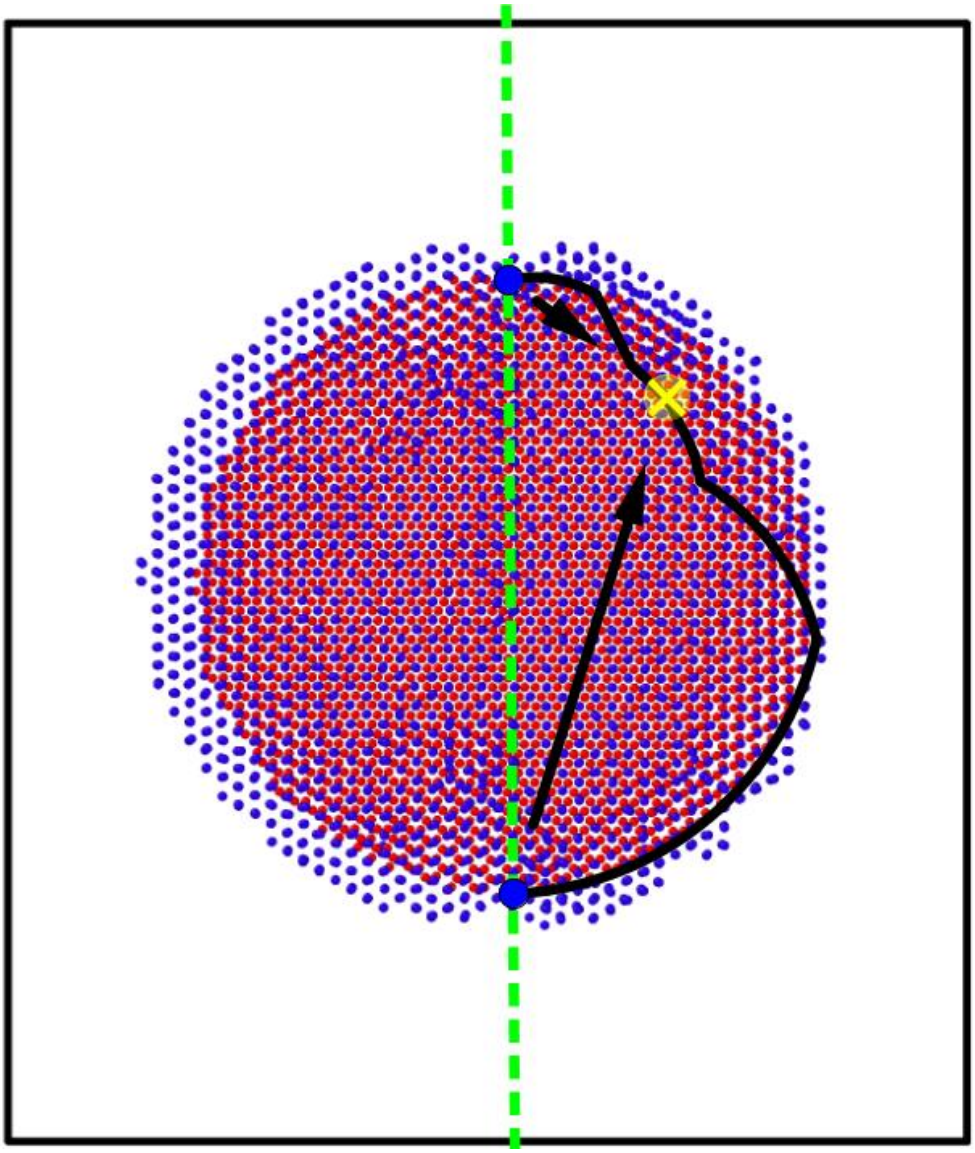

Рис. 14. Непланарное смещение винтовых участков дислокации. Пунктиром отмечена проекция плоскости скольжения в плоскость рисунка. Сплошные лини показывают траекторию движения зон соприкосновения винтовых участков с пластиной. Стрелками указано полное смещение зон соприкосновения. Крест указывает место встречи участков.

Теперь изучим зависимости пиковых напряжений сдвига.

Рассматривались три возможные ширины расчётной области: $l_z = 8.4$ нм, $l_z = 14.0$ нм, $l_z = 19.6$ нм, для пластинок с диаметрами $W \in \{1\text{ нм}, 2\text{ нм}, 3\text{ нм}, 4\text{ нм}, 5\text{ нм}, 8\text{ нм}\}$ и различными ориентациями.

Сначала построим зависимости напряжений при $\beta \approx 0$. А затем рассмотрим влияние наклона пластины к плоскости скольжения.

Проверим насколько хорошо теоретическое соотношение модели BKS описывает случай при ориентации $\alpha \approx 0$, которая визуально наиболее близка к классической схеме Орована. Построим график для серии симуляций указанной ориентацией пластины (рисунок 15). Напряжения будем считать в единицах, относительных к напряжениям Орована $\tau_0 = \dfrac{Gb}{L}$, по оси абсцисс отложим значения $\ln\left(\dfrac{\bar{D}}{2b}\right)$. В таких единицах модель BKS предсказывает линейное поведение:

$$\sigma/\tau_0 = A\left(\ln\left(\frac{\bar{D}}{r_0}\right) + B\right). \tag{4.2.5}$$

Для того, чтобы отметить в таких единицах данные серии симуляций, необходимо задаться определённым значением изотропного модуля сдвига; примем $G = 82$ ГПа [11]. Некоторый произвол в выборе изотропного модуля сдвига для анизотропной модели, выборе радиуса ядра r_0, а также отсутствие учёта влияния включения на поле дислокации говорят в пользу того, что коэффициенты A и B нужно рассматривать всё же скорее как свободные параметры модели, когда есть способ получить их из каких либо соображений. В нашем исследовании мы будем получать эти параметры при помощи линейной регрессии. Видно, что получаемая зависимость действительно близка к линейной, более того модель BKS даёт хорошую оценку для получаемых напряжений, однако линейное приближение можно улучшить, переопределив параметры A и B.

Теперь построим аналогичный график для промежуточных значений угла $\alpha \in \left(0; \dfrac{\pi}{2}\right)$. Полученная зависимость имеет тот же характер, что и предыдущая. Более того, линейная зависимость, полученная для данной серии точек, обнаруживает аналогичное расхождение с моделью BKS. Это позволяет сделать вывод о том, что эти два случая можно рассматривать с единых позиций. В первом случае была получена пара $\{A, B\} = \{0.119, 1.252\}$, а во втором — $\{A, B\} = \{0.121, 1.107\}$.

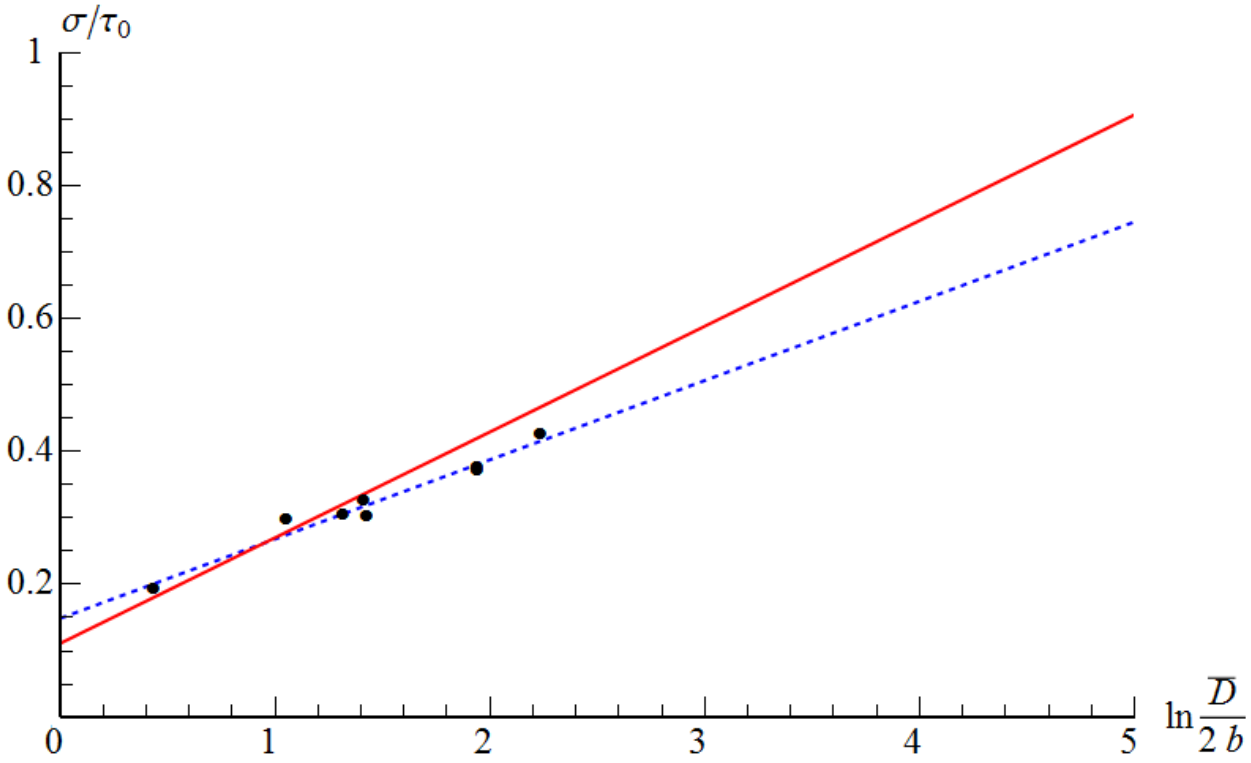

Рис. 15. Сравнение результатов симуляций при ориентациях $\alpha \approx 0, \beta \approx 0$ с моделью BKS. Точки отражают результаты отдельных симуляций, пунктирная линия — приближение линейной регрессии, сплошная линия — модель BKS.

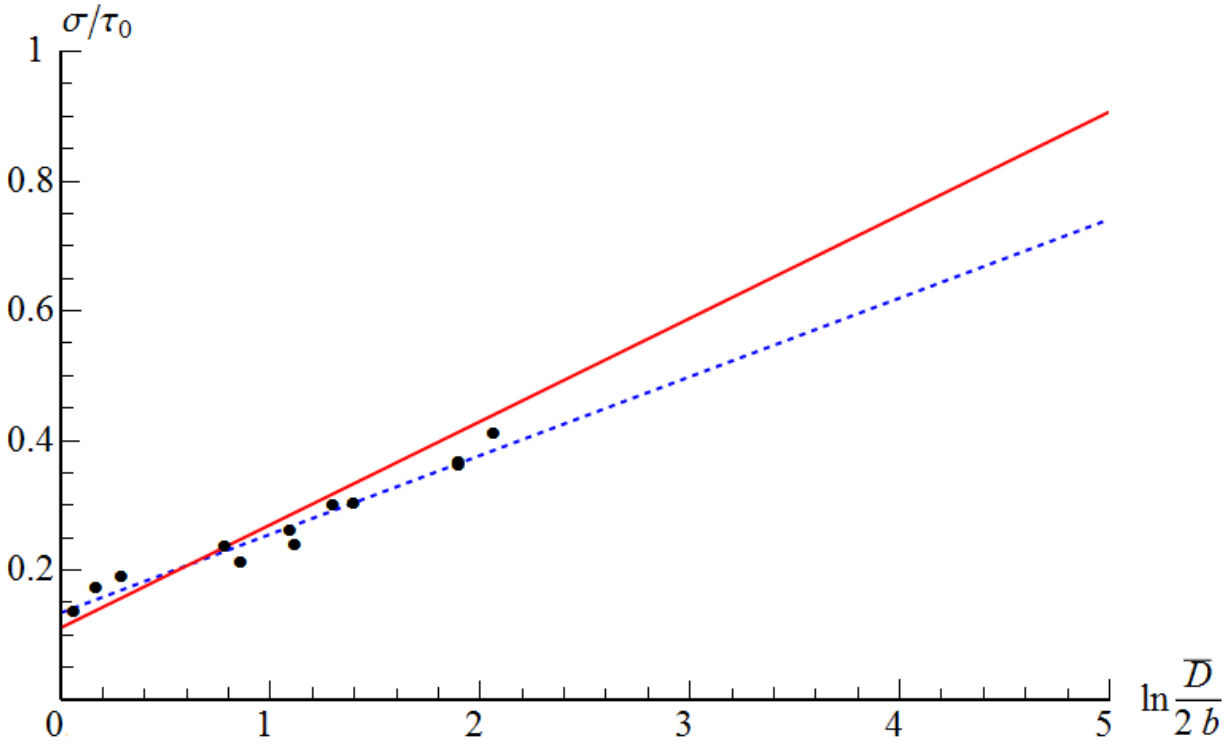

Рис. 16. Сравнение результатов симуляций при ориентациях $\alpha \in (0; \pi/2), \beta \approx 0$ с моделью BKS. Точки отражают результаты отдельных симуляций, пунктирная линия — приближение линейной регрессии, сплошная линия — модель BKS.

В широком диапазоне изменений угла $\beta < \frac{\pi}{2}$ наблюдается сложная зависимость критических сдвиговых напряжений от этого угла, различная для разных углов α. Для того, чтобы однозначно и точно установить эту зависимость необходимо проделать большее количество измерений, нежели это было сделано в данном исследовании. Тем не менее в широком диапазоне углов β отклонения напряжений лежат в пределах 15%. Это позволяет говорить о том, что рассмотренные ранее зависимости дают хорошую оценку и в этом случае. На рисунке 17 и рисунке 18 показаны результаты симуляций при разных углах наклона β для случая $W = 4$ нм, $l_z = 8.6$ нм и двух углов $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi/4$ соответственно.

Если $\beta \approx \frac{\pi}{2}$, то пластина лежит в плоскости сдвига. В этом случае напряжения близки к оценке модели BKS (соответствует точке с максимальным β на рисунках 17-18), но также это значит, что для любого угла α при $\beta \to \frac{\pi}{2}$ напряжения должны стремиться к одному и тому же значению. Тогда, в отличие от относительно небольшого и немонотонного изменения в широком диапазоне углов β, вблизи $\beta = \frac{\pi}{2}$ следует предполагать резкий рост напряжений для углов α, существенно больших 0.

Для всего массива данных при $\alpha < \frac{\pi}{2}$ были определены оптимальные параметры линейной зависимости вида (4.2.5):

$$\boxed{\{A, B\} = \{0.124, 1.105\}}$$

При $\alpha \approx \frac{\pi}{2}$ модель BKS не позволяет произвести оценку напряжений по причине того, что эффективный диаметр барьера становится меньше размера ядра дислокации. Резко меняется предельная конфигурация системы. Поэтому рассматривать этот случай с тех же позиций, что и предыдущие, вряд ли получится. Критические напряжения для $\alpha \approx \frac{\pi}{2}$ соответствуют наименьшему значению по α при прочих равных условиях. Пиковые напряжения в такой конфигурации увеличиваются нелинейно вместе с диаметром пластины,

сложным образом зависят от угла β, уменьшаются при увеличении расстояния между частицами. Результатов нескольких симуляций, произведённых в такой конфигурации недостаточно для того, чтобы обосновано предложить соотношение, описывающее эту многопараметрическую зависимость. Тем не менее, можно отметить, что эти напряжения составляют $45\% - 65\%$ от максимальных значений при $\alpha \approx 0$. Исходя из того, что в конечном итоге нас будут интересовать статистические характеристики материала, можно положить простую оценку $\min_{\alpha}(\sigma) = 0.55 \cdot \max_{\alpha}(\sigma)$, которая не будет приводить к большим ошибкам из-за того, что доля пластин в подобной особой конфигурации в общем количестве разноориентированных пластин будет невелика.

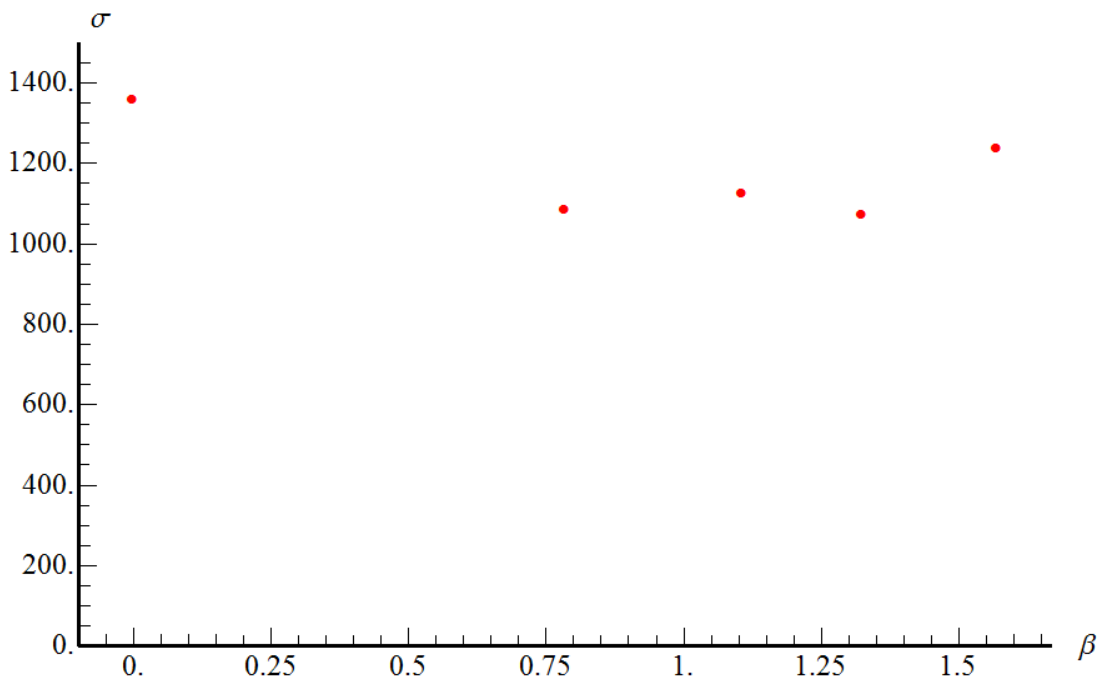

Рис. 18. Зависимость критических напряжений от угла наклона к плоскости скольжения при фиксированном $\alpha = 0$, $W = 4$ нм, $l_z = 8.6$ нм.

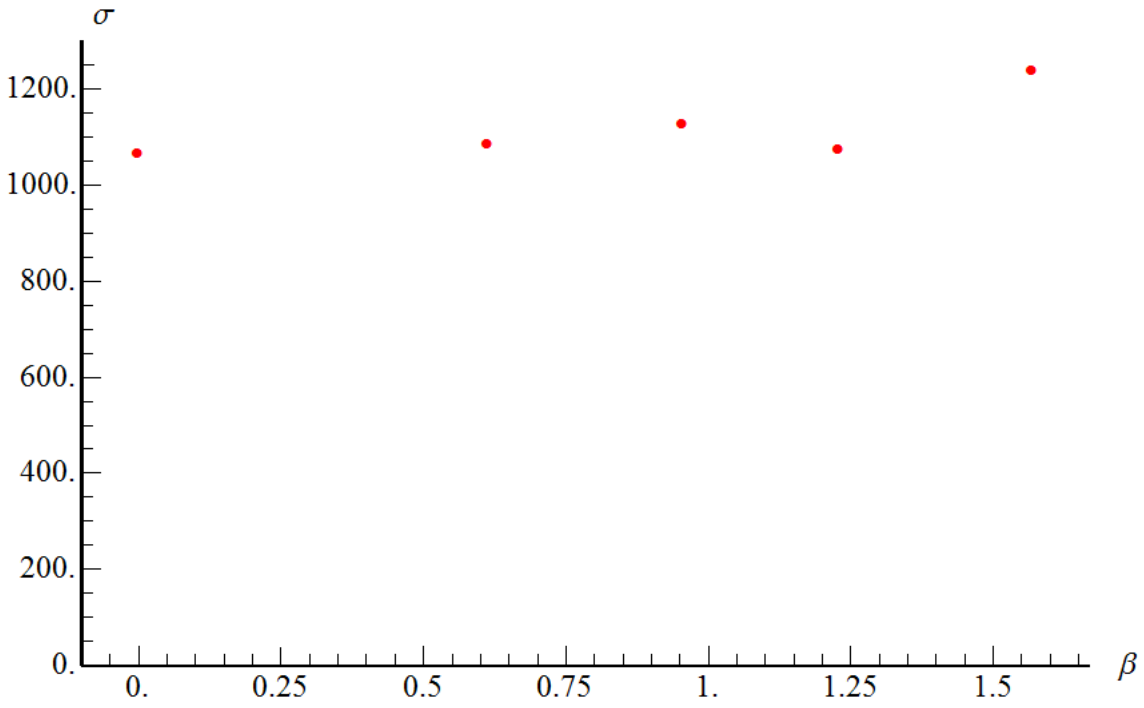

Рис. 17. Зависимость критических напряжений от угла наклона к плоскости скольжения при фиксированном $\alpha = \pi/4$, $W = 4$ нм, $l_z = 8.6$ нм.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе были рассмотрены современные подходы для моделирования скольжения дислокации методом молекулярной динамики. Отдельным результатом работы стал набор сценариев для работы с пакетом LAMMPS. При помощи этого набора сценариев, каждый из которых был разработан с использованием большого числа тестовых симуляций, можно исследовать движение дислокации в кристалле, содержащем включение. В дальнейшем, используя эти наработки, могут быть рассмотрены и другие системы с наноразмерными включениями.

Изучение процесса преодоления нанопластинки графена краевой дислокацией в атомарном разрешении показало, что в критическом положении отрыв контролируется движением винтовых участков, которое может быть непланарным.

Был рассмотрен вопрос применимости модели BKS (2.3), которая ранее была сформулирована для сферических неперерезаемых частиц. Показано, что после введения понятия эффективного диаметра барьера (4.2.4) эта модель даёт хорошую оценку получаемым напряжениям сдвига, но может быть существенно улучшена путём приведения численных коэффициентов к результатам серии симуляций. Отдельно был рассмотрен особый случай с пластиной, расположенной перпендикулярно линии дислокации, который не может быть рассмотрен при помощи модели BKS. Полученные зависимости критических напряжений сдвига могут быть использованы в дальнейшем в рамках многомасштабного моделирования или в статистических моделях для оценки макроскопического предела текучести.

ЛИТЕРАТУАРА

1. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Динамическое торможение дислокаций // Успехи физических наук/ - 1975. т.115, вып. 1.
2. Красников В.С. и др. Пластическая деформация при высокоскоростном нагружении алюминия: многомасштабный подход // Физика твёрдого тела/ - 2010. т. 52, вып. 7.
3. Куксин А.Ю. и др. Молекулярно-динамическое моделирование динамики краевой дислокации в алюминии// Доклады Академии наук/ - 2008. т. 420, №4.
4. Неелов И.М. Введение в молекулярное моделирование биополимеров СПб: НИУ ИТМО, 2014. – 101 с.
5. Bacon et al. Dislocation-Obstacle Interactions at the Atomic Level// Dislocations in Solids/ - 2009. vol. 115. pp. 1-90.
6. Bacon, Kocks, Scattergood The effect of dislocation self-interaction on the Orowan stress// Philosophical Magazine/ - 1973. 28:6, pp. 1241-1263.
7. Bartolucci et al. Graphene-aluminum nanocomposites// Materials and Science Engineering A/ - 2011. 528, pp. 7933-7937.
8. Chen Z. Modeling the plastic deformation of Iron: KIT Scientific Publishing, 2013.
9. Daw et al. // Mater. Sci. Rep./ - 1993. vol 9, p. 251.
10. Gladman Precipitation hardening in metals// Material Science and Technology/ - 1998
11. Ledbetter, Reed Elastic properties
12. Martyna, Tobias and Klein, J Chem Phys, 101, 4177 (1994).
13. Mendelev Philosophical Magazine, 83, 3977-3994
14. Nose, S (1984). "A unified formulation of the constant temperature molecular-dynamics methods". *Journal of chemical physics* **81**
15. Osetsky, Bacon An atomic-level model for studying dynamics of edge dislocations in metals// Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering/ - 2003. vol. 11. pp. 427-446
16. Olmsted et al. Atomistic simulations of dislocation mobility in Al, Ni and Al/Mg alloys// Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering/ - 2005. vol. 13. p. 371
17. Parrinello, Rahman Phys. Rev. Lett. 45, 1196
18. Rashad et al. Effect of graphene nanoplatelets (GNPs) addition on strength and ductility of magnesium-titanium alloys
19. Rodney D. Activation enthalpy for kink-pair nucleation on dislocations: Comparison between static and dynamic atomic-scale simulations// Physical Review B/ - 2007. vol. 76, 144108

20. Shinoda, Shiga, and Mikami, Phys Rev B, 69, 134103 (2004).

21. Stuart, Tutein, Harrison, J Chem Phys, 112, 6472-6486 (2000).

22. Yu-Feng et al. 2011 Chinese Phys. Lett. 28 036102

23. http://lammps.sandia.gov/

24. http://www.ctcms.nist.gov/potentials/Fe.html

Приложение А. Безопасность жизнедеятельности

Анализ и оценка условий труда в вычислительной лаборатории

Для решения задач компьютерного моделирования необходимо использование вычислительной техники. Практика работы с вычислительной техникой показывает, что наиболее эффективной работы и можно добиться при одновременном использовании большого числа электронно-вычислительных машин, сосредоточенных в вычислительном центре (ВЦ), и при тесном сотрудничестве специалистов различного профиля. Критериями выбора оптимального варианта организации работы в ВЦ является техническая эффективность и соответствие требованиям эргономики и охраны труда. Эргономикой изучаются возможности и особенности деятельности человека в процессе труда с целью создания таких условий, методов и организаций трудовой деятельности, которые делают трудовой процесс наиболее производительным и вместе е тем обеспечивают безопасность и удобство работающему, сохраняют его здоровье и работоспособность.

Аттестация рабочих мест осуществляется по условиям труда и фактору травмоопасности с учётом обеспеченности работников средствами индивидуальной защиты. Условия труда определяются с помощью гигиенических критериев по показателям вредности и опасности факторов производственной среды, тяжести и напряжённости трудового процесса. В современных условиях любой труд человека связан с производственным процессом или выполняется с применением техники. В основе умственного труда лежат восприятие, переработка информации и принятие решений. Особенностью данного вида труда является повышенное эмоциональное напряжение, напряжение слуха и зрения и в отдельных случаях — однообразие и простота выполняемых функций (монотония), а также пониженная мышечная активность (гипокинезия).

По природе действия вредные и опасные факторы подразделяются на следующие группы:

1. физические факторы: температура, влажность и подвижность воздуха, неионизирующие электромагнитные излучения (ультрафиолетовое, видимое, инфракрасное, лазерное, микроволновое, радиочастотное, низкочастотное), статическое, электрические и магнитные поля, ионизирующие излучения, производственный шум, вибрация (локальная, общая), ультразвук, аэрозоли преимущественно фиброгенного действия (пыли), освещённость (отсутствие естественного освещения, недостаточная освещённость, повышенная ультрафиолетовая радиация);
2. химические факторы, в том числе некоторые вещества биологической природы (антибиотики, витамины, гормоны, ферменты); Биологические факторы: патогенные

микроорганизмы, микроорганизмы продуценты, препараты, содержащие живые клетки и споры микроорганизмов, белковые препараты;

3, факторы трудового процесса, характеризующие тяжесть физического труда: физическая динамическая нагрузка, масса поднимаемого и перемещаемого груза, стереотипные рабочие движения, статическая нагрузка, рабочая поза, наклоны корпуса, перемещение в пространстве;

4, факторы трудового процесса, характеризующие напряжённость труда: интеллектуальные, сенсорные, эмоциональные нагрузки, монотонность нагрузок, режим работы.

Классы условий труда.

Условия труда на рабочем месте в соответствии с гигиеническими критериями оценки подразделяются на четыре класса:

1, оптимальные условия труда — такие условия, при которых сохраняется не только здоровье работающих, но и создаются предпосылки для поддержания высокого уровня работоспособности. Оптимальные нормативы производственных факторов установлены для микроклиматических параметров и факторов трудового процесса. Для других факторов условно за оптимальные принимаются такие условия труда, при которых неблагоприятные факторы не превышают уровни, принятые в качестве безопасных для населения.

2, допустимые условия труда характеризуются такими уровнями факторов среды и трудового процесса, которые не превышают установленных гигиеническими нормативами для рабочих мест, а возможные изменения функционального состояния организма восстанавливаются во время регламентированного отдыха или к началу следующей смены и не должны оказывать неблагоприятного воздействия в ближайшем и отдалённом периоде на состояние здоровья работающих и их потомство. Оптимальный и допустимый классы соответствуют безопасным условиям труда.

3, вредные условия труда характеризуются наличием вредных производственных факторов, превышающих гигиенические нормативы и оказывающих неблагоприятное воздействие на организм работающего и/или его потомство. Вредные условия труда по степени превышения гигиенических нормативов и выраженности изменений в организме работающих подразделяются на четыре степени вредности:

- условия труда, характеризующиеся такими отклонениями от гигиенических нормативов, которые, как правило, вызывают обратимые функциональные изменения и обусловливают риск развития заболеваемости;
- условия труда с такими уровнями производственных факторов, которые могут вызывать стойкие функциональные нарушения, приводящие в большинстве случаев к росту заболеваемости с временной утратой трудоспособности, повышению частоты общей заболеваемости, появлению начальных признаков профессиональной патологии;
- условия труда, характеризующиеся такими уровнями вредных факторов, которые приводят к развитию, как правило, профессиональной патологии в лёгких формах в период трудовой деятельности, росту хронической общесоматической патологии, включая повышенные уровни заболеваемости с временной утратой трудоспособности;
- условия труда, при которых могут возникать выраженные формы профессиональных заболеваний, отмечаются значительный роет хронической патологии и высокие уровни заболеваемости е временной утратой трудоспособности;

4, опасные (экстремальные) условия труда характеризуются такими уровнями производственных факторов, воздействие которых в течение рабочей смены (или её части) создаёт угрозу для жизни, высокий риск возникновения тяжёлых форм острых профессиональных поражений.

Гигиенические критерии условий труда.

Классы условий труда определяются в зависимости от уровня гигиенических нормативов факторов производственной среды, показателей тяжести и напряжённости трудового процесса**:**

- содержание в воздухе рабочей зоны вредных веществ;
- показатели ионизирующих излучений на рабочих местах;
- показатели электромагнитных излучений на рабочих местах;
- показатели шума и вибрации на рабочих местах;
- параметры световой среды производственных помещений;

- показатели микроклимата в рабочей зоне;
- эргономические требования;
- показатели напряжённости трудового процесса,

Оценка критериев производственной среды.

Содержание в воздухе рабочей зоны вредных веществ. Содержание вредных химических веществ в производственных помещениях, работа на видеодисплейных терминалах (ВДТ) и персональных электронно- вычислительных машинах (ПЭВМ) в которых является основной (диспетчерские, операторские, расчётные, кабины и посты управления, залы вычислительной техники и др.), не должно превышать "Предельно допустимых концентраций загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населённых мест."

Излучения. В настоящее время электронно-лучевые дисплеи практически повсеместно заменены жидкокристаллическими, в которых отсутствует излучение электроннолучевой трубки дисплея (рентгеновское, радиочастотное, видимое и ультрафиолетовое). Однако, работа за компьютером, особенно длительное время, вредит зрению даже с использованием ЖК мониторов. Экран видеомонитора должен находиться от глаз пользователя на оптимальном расстоянии 600-700 мм, но не ближе 500 мм с учётом размеров алфавитно-цифровых знаков и символов. Продолжительность непрерывной работы с ВДТ без регламентированного перерыва не должна превышать 2 часов, рекомендуется использовать комплексы упражнений для глаз.

Уровень шума. На рабочем месте программиста источником шума является вычислительная машина, производящая постоянный небольшой шум. Шум представляет собой сочетание звуков, различных по интенсивности и частоте в частотном диапазоне 16-20 кГц, не несущих полезной информации. Шум вредно воздействует не только на органы слуха, но и на весь организм человека в целом через центральную нервную систему. Шум — причина преждевременного утомления, ослабления внимания, памяти. Постоянным считается шум, уровень звука которого за 8-часовой рабочий день изменяется во времени не более чем на 5дБА, Предельно допустимый уровень (ПДУ) шума 50 дБ (для помещения в котором осуществляется эксплуатация ЭВМ).

Мой персональный компьютер является шумным для своего класса, однако для моего рабочего помещения уровень шума не превышает ПДУ, что соответствует второму (допустимому) классу условий труда. Поэтому применение специальных звукоизоляционных материалов не требуется. Воздействие вибрации, инфра- и ультразвука в помещении отсутствует.

Освещение. Помещения с ВДТ и ПЭВМ должны иметь естественное и искусственное освещение. Естественное освещение должно осуществляться через светопроёмы, ориентированные преимущественно на север и северо-восток, и обеспечивать коэффициент естественной освещённости (КЕО) не ниже 1,2 и не ниже 1,5 на остальной территории, моё рабочее помещение обладает достаточным естественным (окна) и искусственным (система общего равномерного освещения) освещением, а также моё рабочее место дополнительно оборудовано светильниками местного освещения.

Микроклиматические условия. Оптимальные нормы температуры (23-25°С) и относительной влажности (40-60%) для тёплого периода года, а также (22- 24 °С) и (40-60%) соответственно для холодного и переходного, скорости движения воздуха соблюдаются благодаря наличию системы кондиционирования, работающей в режиме автоматического регулирования. Скорость движения воздуха не превышает допустимого значения (0.1 м/с как для холодного, так и для тёплого периода).

Эргономические требования. Рассмотрим более подробно требования эргономики, предъявляемые к рабочему месту оператора при работе с ВДТ. Под рабочим местом понимается зона, оснащённая необходимыми техническими средствами, в которой совершается трудовая деятельность исполнителя или группы исполнителей, совместно выполняющих одну работу или операцию. Организацией рабочего места называется система мероприятий по оснащению рабочего места средствами и предметами труда и их размещению в определённом порядке. Конструкция рабочего места должна обеспечивать быстроту, безопасность, простоту и экономичность технического обслуживания в нормальных и аварийных условиях; полностью отвечать функциональным требованиям и предполагаемым условиям эксплуатации. Площадь на одно рабочее место с ВДТ или ПЭВМ для взрослых пользователей должна составлять не менее 6,0 кв. м., а объем не менее 20,0 куб. м. Рабочие места с ВДТ и ПЭВМ при выполнении творческой работы, требующей значительного умственного напряжения или высокой концентрации внимания, следует изолировать друг от друга перегородками высотой 1,5-2,0 м.

В моём случае эти условия выполняются. Конструкция рабочего стола должна обеспечивать оптимальное размещение на рабочей поверхности используемого оборудования с учётом его количества и конструктивных особенностей (размер ВДТ и ПЭВМ, клавиатуры и др.), характера выполняемой работы. При этом допускается использование рабочих столов различных конструкций, отвечающих современным требованиям эргономики. Высота рабочей поверхности стола для взрослых пользователей должна регулироваться в и пределах 680-800 мм; при отсутствии такой возможности высота рабочей поверхности стола должна составлять 725 мм. Конструкция рабочего стула (кресла) должна обеспечивать подержание

рациональной рабочей позы при работе на ВДТ и ПЭВМ, позволять изменять позу с целью снижения статического напряжения мышц шейно-плечевой области и спины для предупреждения развития утомления. Тип рабочего стула (кресла) должен выбираться в зависимости от характера и продолжительности работы е ВДТ и ПЭВМ с учётом роста пользователя. Рабочий стул (кресло) должен быть подъёмно-поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а также расстоянию спинки от переднего края сиденья, при этом регулировка каждого параметра должна быть независимой, легко осуществляемой и иметь надёжную фиксацию. Поверхность сиденья, спинки и других элементов стула (кресла) должна быть полумягкой, с нескользящим, неэлектризующимся и воздухонепроницаемым покрытием, обеспечивающим лёгкую очистку от загрязнений, Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края, обращённого к пользователю, или на специальной, регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделённой от основной столешницы. Мой стол является не регулируемым по высоте, высота рабочей поверхности составляет 725 мм, что удовлетворяет необходимым требованиям. Рабочий стул также удовлетворяет предъявляемым требованиям.

Напряжённость трудового процесса. Тяжесть моего трудового процесса можно отнести к оптимальному классу условий труда (лёгкая физическая нагрузка): работа связана с интеллектуальной нагрузкой, есть возможность в любое время менять рабочую позу прерываться для отдыха. Как видно из всего выше написанного, моя рабочая обстановка является оптимальной и соответствует всем установленным нормам. Так как выполняемый мной вид работ относится к интеллектуальному виду деятельности, то основная нагрузка на организм ложится на нервную систему и зрение. Остальные факторы являются сопутствующими.

Оценка моей рабочей деятельности по степени напряжённости

1, Содержание работы (интеллектуальные нагрузки)

- решение сложных задач с выбором по известным алгоритмам (напряжённый труд Кой степени);
- иногда эвристическая, творческая деятельность, требующая решения сложных задач при отсутствии алгоритма (напряжённый труд 2-ой степени);

2, Степень сложности задания (интеллектуальные нагрузки) обработка, выполнение задания и его проверка (Допустимый уровень, напряжённость труда средней степени)

3, характер выполняемой работы (интеллектуальные нагрузки)

- Большая часть времени — работа по установленному графику с возможной его коррекцией по ходу деятельности (напряжённый труд 1-ой степени);
- иногда — работа в условиях дефицита времени и информации с повышенной ответственностью за конечный результат (напряжённый труд 2-ой степени); Наблюдение за экранами ВДТ (сенсорные нагрузки) идёт более четырёх часов за рабочий день (напряжённый труд 2-ой степени);

4, Степень ответственности (эмоциональная нагрузка) несёт ответственность за функциональное качество основной работы. Влечёт за собой исправления за счёт дополнительных усилий всего коллектива (напряжённый труд 2-ой степени);

5, Степень риска для собственной жизни (эмоциональная нагрузка) исключена (напряжённость труда лёгкой степени);

6, Степень риска за безопасность других лиц (эмоциональная нагрузка) исключена (напряжённость труда лёгкой степени);

7, Фактическая продолжительность рабочего дня (режим работы) 8-9 часов (напряжённость труда средней степени).

Подводя итог, можно сказать, что условия труда в моем случае являются оптимальными, а сам трудовой процесс можно отнести к напряжённому по количеству условий, относящихся к напряжённому труду первой и второй степени.