

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В НАСЫЩЕННЫХ ВОДОРОДОМ ДВУХФАЗНЫХ БИКРИСТАЛЛАХ Al/θ'

© 2023 г. П. А. Безбородова^а *, В. С. Красников^а, А. Е. Майер^а

^аЧелябинский государственный университет, ул. Бр. Кашириных, 129, Челябинск, 454001 Россия

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

Поступила в редакцию 05.04.2023 г.

После доработки 01.07.2023 г.

Принята к публикации 01.08.2023 г.

Методом молекулярной динамики изучено влияние атомов водорода на деформационное поведение Al/θ' бикристаллов с (001)_{Al}//(001)_{θ'} межфазной границей при сдвиге. При сдвиге в направлении [100]_{Al} параллельном плоскости (001)_{Al} первоначальное испускание дислокаций с межфазной границы приводит к развитию проскальзывания по границе с образованием разупорядоченного слоя атомов в алюминии. Критическое напряжение активации пластической релаксации в этом случае достигает 6.4 ГПа. При сдвиге [100](010)_{Al} пластическая релаксация происходит за счет генерации и скольжения дислокаций в алюминии, а так же пластического течения в слое θ'-фазы, в этом случае пластическая релаксация активируется при сдвиговом напряжении 7.9 ГПа. Введение водорода в систему приводит к понижению критических напряжений в среднем на 34% вследствие значительного снижения стойкости материала θ'-фазы к сдвигу. Системы с водородом демонстрировали большую чувствительность к понижению скорости деформации, снижение скорости деформации в 20 раз сопровождается снижением критических напряжений на 20%, в то время как для бикристаллов без водорода аналогичное снижение составляет 5%. Повышение температуры приводит к снижению критических напряжений со средним коэффициентом температурной чувствительности –4 МПа/К.

Ключевые слова: деформация, водородное охрупчивание, межфазные границы, θ'-фаза, молекулярная динамика

DOI: 10.31857/S0015323023600569, EDN: DMLCBB

ВВЕДЕНИЕ

Проблема снижения механических свойств металлов и сплавов при насыщении их атомами водорода, называемая водородным охрупчиванием (ВО), привлекает внимание исследователей уже более ста лет [1, 2]. Известно, что сплавы Al–Cu обладают высокой стойкостью к водородному охрупчиванию, однако и в их случае водород проникает в объем материала в процессе функционирования, приводя к снижению эксплуатационных характеристик сплава [3]. Механические свойства сплавов во многом определяются фазовым составом и распределением по размерам интерметаллических включений. В настоящее время вопросы, связанные с влиянием атомов водорода на деформационное поведение сплавов Al–Cu, активно изучаются, однако полное понимание деформационных механизмов не достигнуто. В работах [4, 5] показано, что упрочняющие включения вторых фаз накапливают во-

дород, что в значительной мере ответственно за деградацию механических свойств сплава.

Пластические свойства сплавов, обеспечиваемые, в том числе, межфазными процессами, и процессами, происходящими на границах зерен, активно изучаются с помощью атомистического моделирования и электронной микроскопии, позволяющими выявить особенности пластической деформации на атомарном уровне [6]. По сравнению с монокристаллическим состоянием металла, в бикристаллах наблюдаются более сложные деформационные механизмы [7–9]. Межфазные границы в сплавах Al–Cu оказывают существенное влияние на деформационное поведение, в настоящее время существует множество как экспериментальных [10–14], так и теоретических [14, 15] работ, посвященных влиянию межфазных границ на поведение кристалла при деформации.

При изучении свойств сплавов Al–Cu особое внимание уделяется изучению свойств θ' -фазы – основного упрочняющего включения в сплавах Al–Cu [16–18]. Широкая грань θ' полностью когерентна с матрицей ГЦК-Al по плоскости (001), а кромка включения полукогерентна с матрицей ГЦК-Al по плоскости (010), что приводит к большому соотношению длин сторон: включения θ' -фазы часто имеют толщину 1–10 нм при длине 0.1–1 мкм. По сравнению с θ , θ' демонстрирует более высокую устойчивость к деформации и частоту образования. Помимо высокой плотности и прочности, а также отношения размеров сторон θ' , границы раздела $(001)_{Al}/(001)_{\theta'}$ вносят значительный вклад в ползучесть сплавов Al–Cu, препятствуя движению дислокаций при деформации [19].

Большое количество работ посвящено изучению роли наноразмерных упрочняющих включений θ' [20–23]. В то же время, плохо исследованными остаются механизмы развития пластического течения в случае крупных включений θ' , когда существенную роль могут играть процессы на межфазных границах. В работе [24] показано, что взаимодействие дислокации в системе $[1\bar{1}0](111)$ с протяженной межфазной границей может приводить к активации скольжения по плоскости (100) вдоль когерентной границы включения θ' с Al-матрицей. В работе [25] изучены механизмы деформации, инициирующиеся на межфазной границе Al и θ' , и исследованы структура и свойства границ раздела $(001)_{Al}/(001)_{\theta'}$ с использованием атомистического моделирования. Результаты моделирования показывают, что межфазная граница состоит из двух наборов дислокаций несоответствия. При приложении сдвиговой деформации реализуется межфазный сдвиг за счет скольжения дислокаций несоответствия вдоль границы раздела. Развитие деформации приводит к накоплению решеточных дислокаций на межфазных границах раздела и последующей активации пластичности включений θ' , реализующейся посредством локализованных сдвигов в плоскостях $(1\bar{2}1)_{\theta'}$. Для системы Al– θ' остается неизученной активация пластического течения на межфазной границе в случае отсутствия первоначальных дислокаций, что может быть актуальным при изучении деформации малых объемов вещества, например, микро- и наностолбиков, или в случае высокоскоростной деформации.

В ранее опубликованной работе [26], методом молекулярной динамики определены энергетически предпочтительные места накопления водорода вблизи межфазной границы θ' -фазы в Al-мат-

рице. Показано, что энергии атомов водорода на межфазной границе и внутри включения значительно ниже энергии атомов водорода в алюминиевой матрице на удалении от границы. Накопление водорода в объеме θ' вызывает снижение сопротивляемости включения сдвигу и вызывает смену механизма взаимодействия дислокации с включением от формирования петли Орована к перерезанию. Для оценки критических напряжений сдвига в чистых и насыщенных водородом θ' -фазах рассматривались системы, состоящие только из материала θ' -фазы. Было показано, что при насыщении водородом материала θ' фазы сдвиговые напряжения в системе снижаются.

В предыдущих работах было проведено исследование взаимодействия дислокаций и уединенных включений размером до 20 нм [22, 26–28]. В упомянутых работах исследовались механизмы огибания и перерезания включения θ' в том числе, насыщенного водородом. В настоящее время достаточно активно ведутся работы по возбуждению ударных волн в тонких пленках ультракоротким лазерным облучением, в которых на фронте скорость деформации составляет 10^9 – 10^{10} 1/с [29–31]. Интерес в таких исследованиях связан как с развитием теоретических представлений о механизмах деформации вещества при ультравысоких скоростях деформации, так и с практическими задачами разработки защиты космических аппаратов, движущихся с высокой скоростью, и применения коротких лазерных импульсов для поверхностного упрочнения металлов [32, 33]. При указанных скоростях деформации феноменологические модели пластичности перестают работать, что требует применения физически обусловленных моделей для описания распространения ударных волн. В условиях столь высоких скоростей деформации амплитуды упругих предвестников могут достигать нескольких ГПа, а малое время нарастания напряжений может вызывать ситуацию, когда имеющихся в металле дислокаций и других носителей пластической деформации может быть недостаточно для эффективной релаксации сдвиговых напряжений. В этих условиях могут реализовываться специфические особенности пластической релаксации, такие как сверхзвуковое движение дислокаций, гомогенное зарождение дислокаций в объеме металла, гетерогенное зарождение дислокаций с межфазных границ и др. В нашей работе мы рассматриваем возможный вклад межфазных границ в релаксацию напряжений при сверхвысоких скоростях деформации, когда классические механизмы не успевают снимать напряжения.

Для дальнейшего изучения влияния атомов водорода на пластическую деформацию Al–Cu

сплава предложена система, представляющая собой бикристалл, одна из частей которого состоит из ГЦК-Al, а вторая из тетрагональной θ' -фазы. Система бикристалла позволяет изучить поведение межфазных границ и механизмы генерации дислокаций, а также другие возможные особенности пластической деформации, наблюдаемые при высокой скорости деформации в образцах, где экспериментально обнаружены включения θ' с характерными размерами порядка 100 нм. Исследования ВО-сплавов и роли межфазных границ в нем в настоящее время только начинают развиваться. Получены только результаты первопринципных расчетов энергии растворения водорода и когезии матрицы и границы [34]. Эти результаты свидетельствуют о высокой значимости именно межфазных границ в накоплении водорода и последующим его влиянии на ВО алюминиевых сплавов. Особенности пластической деформации вблизи межфазной границы Al/ θ' в присутствии водорода к настоящему времени не исследовались.

ПОСТАНОВКА МД ЗАДАЧИ

В данной работе исследовали влияние атомов водорода на активацию пластического течения в Al/ θ' бикристалле с изначально совершенной кристаллической решеткой внутри каждой части системы. На рис. 1 представлено схематическое изображение бикристалла, межфазные границы закрашены серым. При моделировании кристаллографические направления $[100]_{Al}/[100]_{\theta'}$, $[010]_{Al}/[010]_{\theta'}$ и $[001]_{Al}/[001]_{\theta'}$ были заданы как оси x , y и z декартовой системы координат. Все направления системы выбраны периодическими, что дает возможность рассматривать системы с протяженной межфазной границей. Системы для молекулярно-динамических расчетов создавались путем сопряжения слоев каждого из материалов, так чтобы на межфазной границе алюминиевая матрица была когерентна решетке θ' -фазы. Каждый слой сформирован транслированием элементарных ячеек Al и θ' по трем кристаллографическим направлениям с учетом того, что постоянные элементарной ячейки ГЦК-алюминия $a = 4.04 \text{ \AA}$ и тетрагональной ячейки θ' -фазы $a = 4.04 \text{ \AA}$, $c = 5.8 \text{ \AA}$ известны из эксперимента [14].

Молекулярно-динамические (МД) расчеты выполняли с использованием пакета LAMMPS [35]. Для описания межатомных взаимодействий в тройной системе Al–Cu–H применяли потенциал ВОР, предложенный в работе [36]. Как показали авторы, потенциал хорошо воспроизводит константы решетки, энергию когезии, упругие

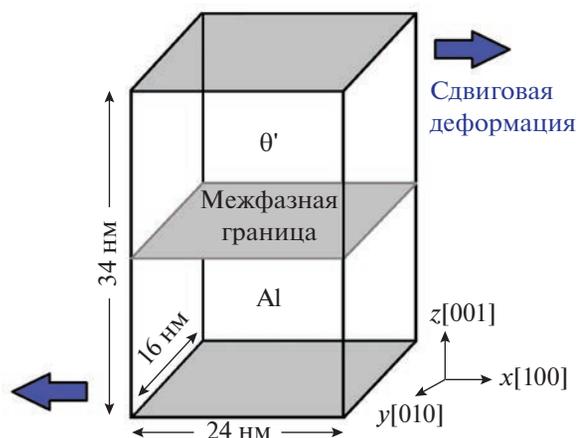


Рис. 1. Схематическое изображение системы.

свойства, близкие к результатам расчетов по теории функционала плотности в первом приближении и к экспериментальным данным. В нашем исследовании мы рассматриваем простой сдвиг в направлении $[100]_{Al}$ параллельном плоскости $(001)_{Al}$, соответствующий деформации ϵ_{xz} , и сдвиг $[100](010)_{Al}$ с деформацией ϵ_{xy} . В предварительных расчетах было установлено, что системы демонстрируют одинаковое течение пластической деформации при сдвиге $[100](001)_{Al}$ и $[010](001)_{Al}$. Деформация производится при температурах: 100, 300, 500, 700 К и скоростях 10^{10} и $5 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$. Выбор высоких скоростей деформации обусловлен ресурсозатратностью МД расчетов с выбранным потенциалом. Скорости деформации такого порядка достигаются на фронте ударной волны, возбуждаемой мощным ультракоротким лазерным облучением [37]. Последнее время большое внимание исследователей привлекает технология лазерной ударной обработки, используемая для увеличения прочности поверхности металлов и сплавов [37–39]. Таким образом, исследование процессов высокоскоростной деформации помимо научного интереса важно и в технологических приложениях.

Рассмотрены два размера бикристаллов: 1) первая система представляет собой бикристалл с размерами $240 \times 160 \times 340 \text{ \AA}^3$, одна половина которого состоит из материала θ' , а другая – ГЦК-алюминия; данная система содержит 844 800 атомов; 2) создавая вторую систему мы увеличили в два раза слой бикристалла, состоящий из ГЦК-алюминия. Данная система имеет размеры $240 \times 160 \times 520 \text{ \AA}^3$ и содержит 1257600 атомов. Начальные состояния систем созданы с использованием пакета Atomsk [40].

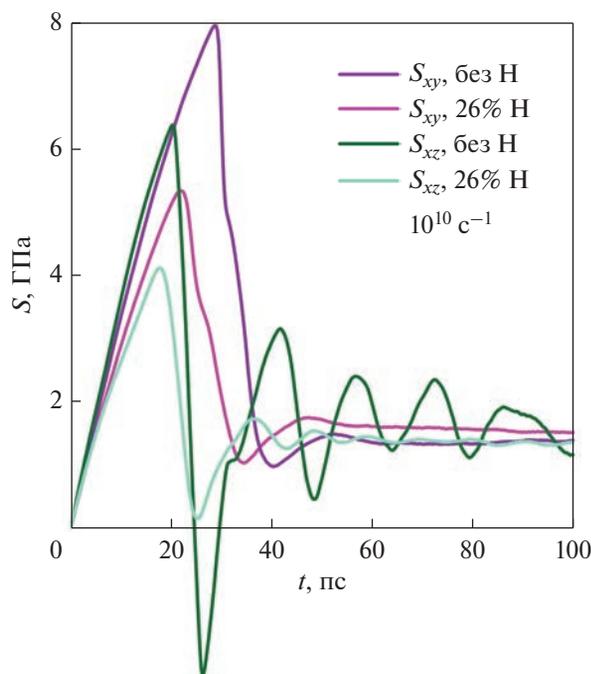


Рис. 2. Зависимость напряжения в системе от времени деформации. Малый бикристалл, скорость деформации 10^{10} c^{-1} , $T = 300 \text{ K}$.

Для двух размеров систем были рассмотрены два состояния: системы без водорода и системы с 26% концентрацией атомов водорода в материале θ' -фазы. Основные исследования проведены для бикристалла меньшего размера. Для него проведена серия из 16 расчетов при скорости деформации 10^{10} c^{-1} : рассматривались два направления деформации (ϵ_{xz} и ϵ_{xy}), четыре температуры (100, 300, 500, 700 K) и два состояния (без водорода и с 26% концентрацией водорода в материале θ'). Для исследования скоростной зависимости проведены 4 расчета с пониженной скоростью деформации $5 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$ для малой системы при комнатной температуре. Для системы большего размера проведено 4 расчета при температуре 300 K и скорости деформации 10^{10} c^{-1} .

Молекулярно-динамические расчеты включают в себя два этапа. На первом этапе для исходной структуры бикристалла производилась минимизация энергии. Далее для систем, содержащих водород, для гашения волн, возникающих в кристалле вследствие расширения системы при нагревании, реализована следующая процедура: 1) атомам системы задавалось распределение скоростей по Максвеллу при заданной температуре; 2) после чего производилась выдержка системы в *NPT*-ансамбле, реализующем гашение колебаний, при заданной температуре и нулевых компонентах тензора напряжений в течение 5 пс. Ком-

бинация вязкого гашения осцилляций при термостатировании системы и случайного задания скоростей в начале каждой итерации процедуры эффективно гасила согласованное движение атомов, подавляя волны в системе. Такая процедура повторялась 10 раз, суммарная длительность составляла 50 пс. В случае отсутствия водорода система помещается в условия *NPT* баро- и термостатирования на 20 пс при заданной температуре и нулевых компонентах тензора напряжений.

На втором этапе сдвиговая деформация с фиксированной скоростью сдвига, эквивалентной скорости деформации 10^{10} и $5 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$, осуществлялась с помощью команды *fix deform*. Системы, деформируемые со скоростью 10^{10} c^{-1} , достигают величины деформации 0.5, для скорости $5 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$ достигается деформация 0.25.

Анализ и визуализация полученных данных осуществляется с помощью пакета OVITO [41]. Дислокационные сегменты идентифицируются с помощью алгоритма DXA [42]. В дополнение к DXA для обнаружения других дефектов, возникающих при пластической деформации, используется центрально-симметричный параметр [43]. Дополнительно вычислялись вектора смещений атомов из их начальных положений за вычетом смещений, связанных с общей деформацией системы (аффинное преобразование). В качестве количественных характеристик изучаемых процессов используются усредненные по системе механические напряжения, которые получают усреднением по большому числу атомов и поэтому могут рассматриваться как полный аналог напряжений, используемых в механике сплошной среды.

РЕЗУЛЬТАТЫ МД ИССЛЕДОВАНИЯ

В данной работе исследуется влияние атомов водорода на активацию пластического течения и механизмы пластической релаксации в Al/ θ' бикристалле. Полученные данные показывают сложную взаимосвязь деформационных процессов в алюминиевой и заполненной θ' -фазой частях бикристаллической системы.

На рис. 2 приведены сдвиговые напряжения в системе в зависимости от времени деформации для малой МД-системы при скорости деформации 10^{10} c^{-1} . Первоначальный упругий рост напряжений приводит к активации пластического течения и сбросу напряжений, которые далее колеблются вблизи уровня, лежащего в пределах от 1 до 2 ГПа. В табл. 1 приведены максимальные напряжения в больших МД-системах при той же скорости деформации для температуры 300 K. Видно, что размер системы слабо влияет на пороговые напряжения начала пластического течения

и дальнейшую эволюцию напряжений. Также в табл. 1 представлены результаты расчетов при $T = 300$ К для малого бикристалла при скорости деформации 5×10^8 с⁻¹. Для систем без водорода средние по системе сдвиговые напряжения выше, по сравнению с системами, содержащими водород в материале θ' , для деформаций ϵ_{xz} и ϵ_{xy} .

Первоначальная деформация вызывает упругий рост напряжений, продолжающийся до момента начала пластической деформации. Отклонения кривых от линейной зависимости на ранних стадиях связаны с изменением упругих модулей с ростом деформации. Пластическая деформация в системах развивается за счет активации дислокационных источников, а также активируются другие механизмы пластичности. Отсутствие первоначальных дислокаций в системе позволяет достигнуть высоких напряжений до момента активации того или иного механизма пластической релаксации.

В случае деформации ϵ_{xz} активируется проскальзывание по границам и разориентация зерен, также наблюдается зарождение дислокаций как в объеме Al, так и с межфазных границ. Для ϵ_{xy} деформации характерно формирование дислокационных петель преимущественно с межфазных границ.

В МД-расчетах рассматривалось два размера системы: бикристалл с размерами $240 \times 160 \times 340$ Å³ и бикристалл с увеличенным слоев алюминия и размерами $240 \times 160 \times 520$ Å³. Исследование влияния толщины слоя алюминия важно, поскольку в реальных сплавах Al–Cu включения θ' -фазы разделены большими слоями алюминия. Увеличение размера алюминиевого слоя в два раза практически не влияет на механизмы деформации как при ϵ_{xy} , так и при деформации ϵ_{xz} . Разница в уровнях напряжений при температуре 300 К для бикристаллов двух размеров не превышает 5%, что укладывается в рамки статистического разброса типичного для МД-расчетов.

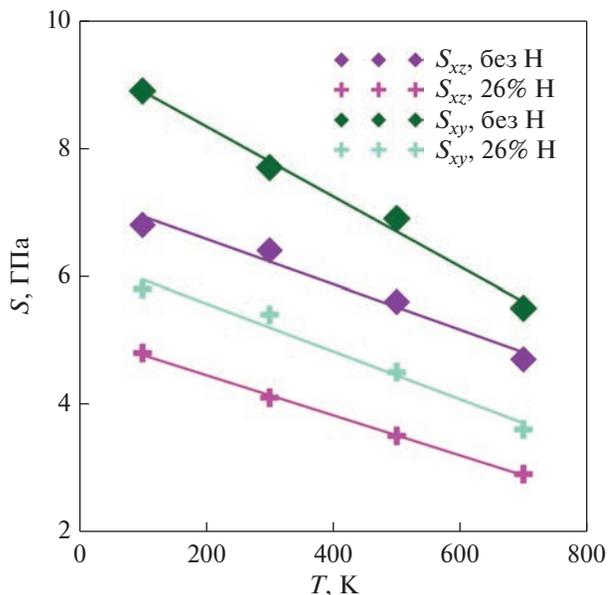


Рис. 3. Зависимости критических напряжений в системах от температуры для разных направлений сдвига и содержания водорода. Малый бикристалл, скорость деформации 10^{10} с⁻¹.

Для выявления зависимости напряжений в системе от времени деформации при различных температурах были проведены расчеты для меньшего размера бикристалла при скорости деформации 10^{10} с⁻¹ при температурах 100, 300, 500 и 700 К. С ростом температуры атомы в системе становятся более подвижными, роль термических активаций возрастает, вследствие чего понижаются пороги зарождения дислокаций и активации проскальзывания зерен по границам. В связи с этим наблюдается снижение уровня напряжений с увеличением температуры для всех рассмотренных случаев во всем диапазоне деформаций. Зависимости критических сдвиговых напряжений от температуры (рис. 3) демонстрируют с хорошей точностью линейное снижение критических напряжений с увеличением температуры.

Таблица 1. Максимальные напряжения в системах при температуре 300 К, ГПа

ε	Малый бикристалл, 10^{10} с ⁻¹		Малый бикристалл, 5×10^8 с ⁻¹		Большой бикристалл, 10^{10} с ⁻¹	
	ϵ_{xz}	ϵ_{xy}	ϵ_{xz}	ϵ_{xy}	ϵ_{xz}	ϵ_{xy}
Без H	6.4	7.9	4.4	7.5	6.4	7.5
26% H	4.1	6.7	3.5	6	4	5.5

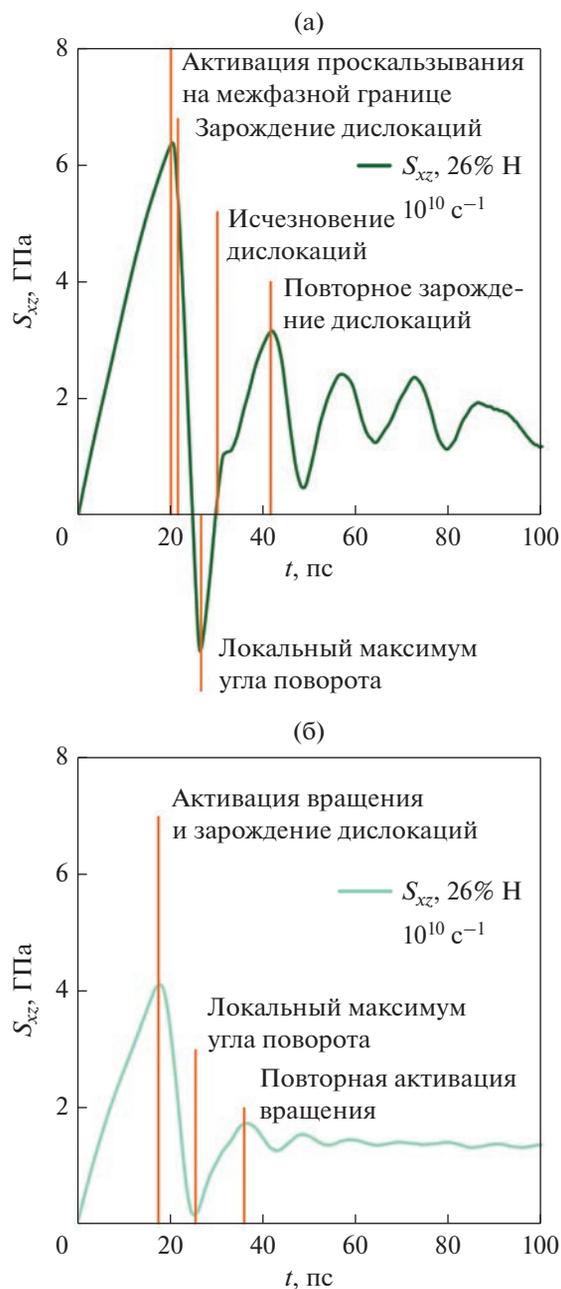


Рис. 4. Зависимость напряжения в системе от времени деформации для бикристалла малого размера при $T = 300 \text{ K}$: ϵ_{xz} -деформация, система без водорода (а); ϵ_{xz} -деформация, система с 26% Н (б).

Средний коэффициент теплового разупрочнения составляет -4 МПа/К .

МЕХАНИЗМЫ ПЛАСТИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ

1. Скорость деформации 10^{10} c^{-1}

На рис. 4 отражены зависимости напряжения в системе без водорода и с водородом от времени для бикристалла малого размера и скорости де-

формации 10^{10} c^{-1} . Для более детального описания механизма пластической деформации рассмотрим случай для бикристалла меньшего размера без водорода и ϵ_{xz} -деформации (рис. 4а). Стадии развития пластической деформации при ϵ_{xz} -деформации и системы без водорода представлены вна рис. 5. Максимальное достигнутое сдвиговое напряжение в этом случае составляет 6.4 ГПа . На рис. 5а видно формирование разрыва смещений верхней и нижней частей системы на

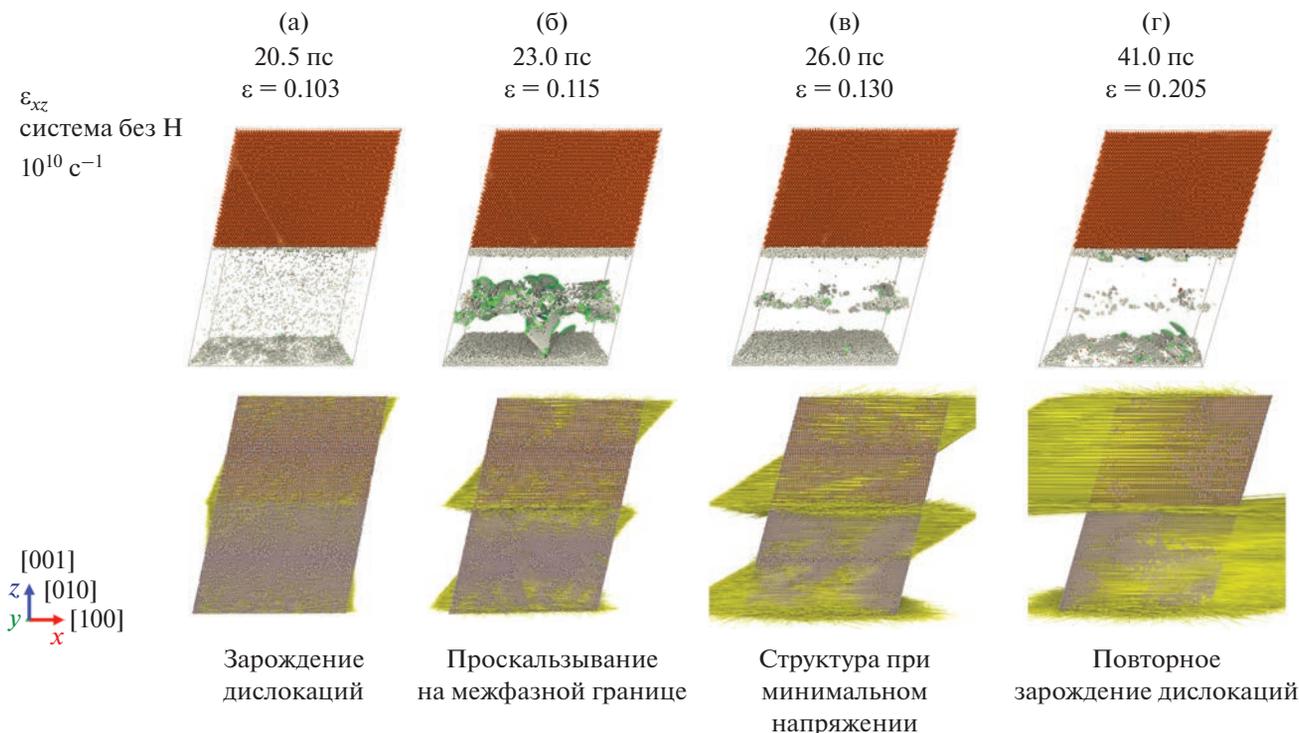


Рис. 5. Стадии развития пластической деформации в малом бикристалле: ϵ_{xz} -деформация, система без H, скорость деформации 10^{10} c^{-1} , $T = 300 \text{ K}$. В верхней части рисунка показаны атомы меди (оранжевые точки on line), атомы алюминия, центральносимметричный параметр которых превосходит 5 (серые точки) и дислокационные сегменты (зеленые линии on line). В нижней части рисунка показаны все атомы системы и вектора их смещений из начального положения. а–г – разные стадии деформации.

межфазной границе. При этом алюминиевая часть системы свободна от дефектов.

Рисунок 5б демонстрирует распределение векторов смещений атомов. Отчетливо заметен разрыв смещений на межфазных границах, а характер распределения вдоль вертикального направления свидетельствует о вращении половинок бикристалла. При проскальзывании частей бикристалла относительно друг друга в алюминии вблизи межфазной границы формируется разупорядоченный слой атомов (рис. 5б и 5в), за счет которого становится возможным взаимное движение половинок системы. Скорость релаксации напряжений, связанная с вращением зерен, оказывается недостаточной для компенсации скорости внешней деформации, что приводит к активной генерации дислокаций в системе на момент времени 23 пс (см. рис. 5б). Формирование дислокаций происходит из слоя разупорядоченных атомов в алюминии вблизи обеих межфазных границ. Дислокации имеют типичный характер для ГЦК-системы с частичным вектором Бюргерса $[11\bar{2}]$, лежащим в плоскости (111). При увеличении сдвиговой деформации происходит интен-

сивное испускание дислокаций из разупорядоченного слоя вблизи межфазных границ, что приводит к значительному росту числа дислокаций в системе. Совместное действие двух механизмов пластической релаксации – межфазного проскальзывания при вращении частей системы и дислокационного скольжения – приводит к резкому понижению действующих в системе напряжений, а поскольку при активации вращения происходит согласованное движение атомов каждой из частей системы, то такой процесс обладает инерционностью, вследствие которого напряжения в системе понижаются в область отрицательных значений.

Провал напряжений в системе происходит на момент 26 пс до величины -2.3 ГПа и соответствует максимальному смещению атомов в горизонтальном направлении. Угол разориентировки в этот момент времени максимальный и составляет около 5° . Остановка вращения приводит к понижению скорости пластической релаксации, что вызывает рост сдвиговых напряжений, начиная с момента времени 26 пс. Испущенные дислокации, двигаясь в алюминиевой части системы, аннигилируют друг с другом, на рис. 5б вид-

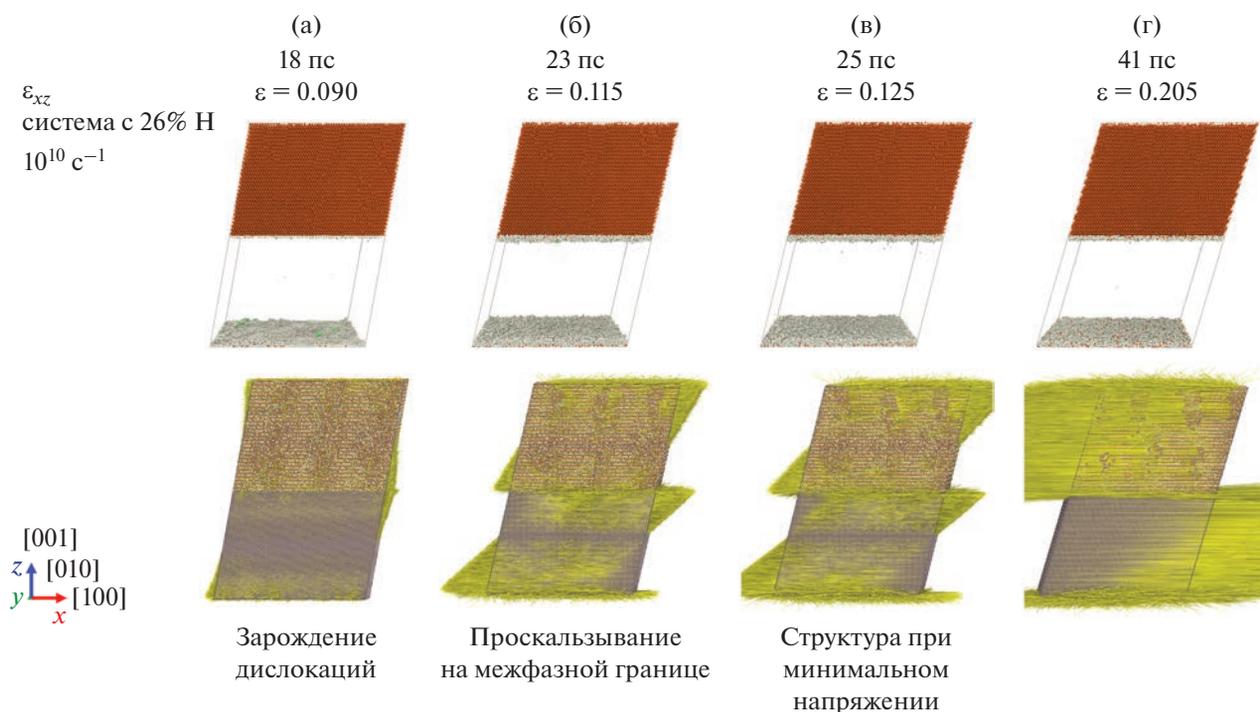


Рис. 6. Стадии развития пластической деформации в малом бикристалле: ϵ_{xz} -деформация, система с 26% концентрацией H, скорость деформации 10^{10} c^{-1} , $T = 300 \text{ K}$. В верхней части рисунка показаны атомы меди (оранжевые точки on line), атомы алюминия, центральносимметричный параметр которых превосходит 5 (серые точки) и дислокационные сегменты (зеленые линии on line). В нижней части рисунка показаны все атомы системы и вектора их смещений из начального положения. а–г – разные стадии деформации.

ны дефекты, образованные примерно посередине алюминиевой части системы в результате аннигиляции дислокационных сегментов. Дислокационные сегменты могут, приближаясь к противоположной межфазной границе, поглощаться разупорядоченным слоем атомов. Совместное действие аннигиляции и поглощения дислокаций приводит систему к состоянию без дислокаций на момент 26 пс (см. рис. 5в). Дальнейшая деформация ведет к чередованию циклов активного испускания и поглощения дислокаций межфазными границами (рис. 5г), в результате чего зависимости напряжений от времени приобретают зигзагообразный вид (см. рис. 4а).

Для системы с 26% концентрацией водорода в слое θ' -фазы зависимость напряжения в системе от времени деформации приведена на рис. 4б. Стадии развития пластической деформации в малом бикристалле с 26% концентрацией водорода отражены на рис. 6. В этом случае происходит активация проскальзывания и разориентировка двух частей бикристалла, дислокации появляются с межфазной границы (рис. 6а) на момент 18 пс, максимальное достигнутое сдвиговое напряжение в этом случае составляет 4 ГПа. По

сравнению с системой без водорода в данной системе активация пластического течения происходит раньше, что может быть объяснено понижением устойчивости материала θ' -фазы к сдвигу, как отмечалось в [23]. Первоначальное формирование дислокаций на межфазной границе на момент времени 18 пс (рис. 6а) приводит к быстрому нарушению структуры межфазной границы, в результате чего развивается проскальзывание вдоль границы с формированием разупорядоченного слоя атомов (рис. 6б, 6в, 6г). Дислокационные механизмы оказываются подавленными, поскольку скорости пластической релаксации за счет проскальзывания достаточны для снятия напряжений. Алюминиевая часть системы остается чистой от дислокаций на протяжении всей деформации (рис. 6). Падение напряжений после максимального значения происходит до величины 0.17 ГПа на 25 пс (см. рис. 4б). В этом случае не наблюдается провала сдвигового напряжения до отрицательных значений, что объясняется ранней активацией вращения частей системы, в результате чего силы, действующие на части системы, оказываются ниже и инерционность приводит к па-

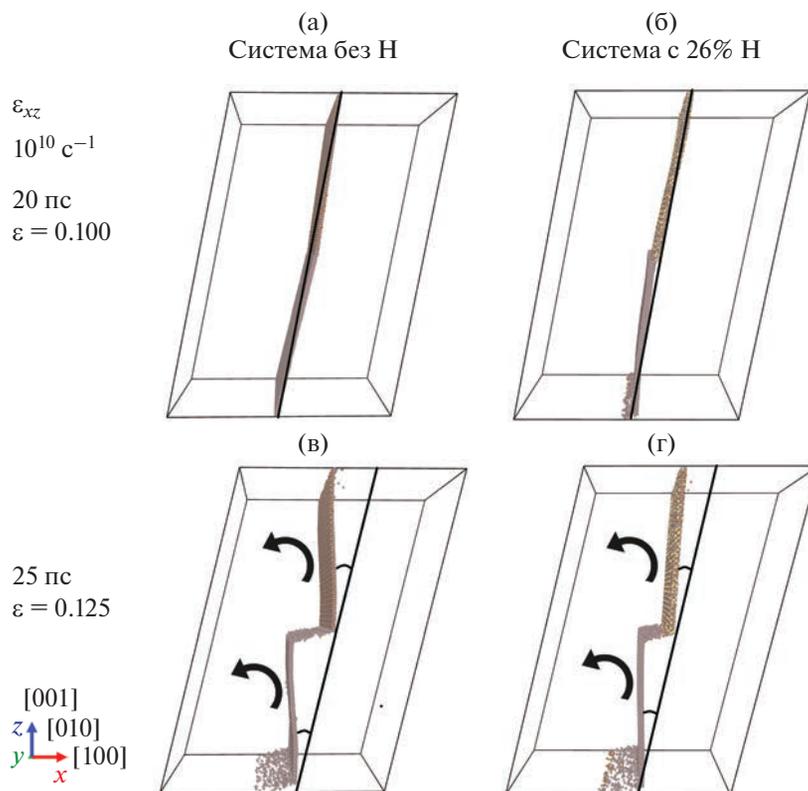


Рис. 7. Активация проскальзывания и поворота (а, б) и достижения максимального угла разориентировки (в, г) в малом бикристалле, $T = 300$ К. ϵ_{xz} -деформация, система без водорода (а, в); ϵ_{xz} -деформация, система с 26% Н (б, г).

дению напряжений, но не до отрицательных значений.

Участок на графике, соответствующий минимальному значению напряжений, соответствует локальному максимуму смещения атомов частей системы (рис. 6в). С дальнейшим развитием деформации дислокации в системе не образуются, происходит поворот обеих частей бикристалла на угол равный 5° против часовой стрелки с проскальзыванием по межфазной границе. При дальнейшей деформации этот угол поворота начинает уменьшаться.

На рис. 7 показаны моменты активации проскальзывания и поворота (рис. 7а, 7б) и достижения максимального угла разориентировки (рис. 7в, 7г) обеих частей бикристалла для системы без водорода и с 26% концентрацией водорода. Видно, что появление разориентировки активирует проскальзывание вдоль межфазной границы, что ведет к снижению напряжений в системе (см. рис. 7).

В случае ϵ_{xy} -деформации со скоростью 10^{10} с^{-1} дислокации начинают зарождаться с межфазных границ, а затем заполняют весь объем алюминия, как в случае системы с водородом, так и для си-

стемы без водорода (рис. 8). Пластическая релаксация в этом случае происходит за счет испускания дислокаций с межфазных границ. Дислокации в алюминии скользят по плоскостям (111) и имеют характер частичных дислокаций Шокли с вектором Бюргерса, направленным вдоль $[11\bar{2}]$. В системе без водорода максимальное напряжение в системе соответствует 7.9 ГПа, далее происходит зарождение первых петель в момент 27 пс (рис. 8а), а на момент 28.5 пс в алюминиевой части наблюдается большое количество дислокационных сегментов.

Развития проскальзывания по границам в этом случае не происходит и слой разупорядоченных атомов не формируется. Отсутствие поглощения дислокаций приводит к их накоплению в алюминиевой части. Так же отсутствие проскальзывания приводит к совместному деформированию обеих частей системы, а отсутствие вращения приводит к росту сдвиговых напряжений в слое θ' . Рост сдвиговых напряжений в слое θ' приводит к развитию пластического течения в нем, что происходит на момент 33 пс (рис. 8в).

Пластическое течение в θ' -фазе отчетливо видно по формированию локальных областей сме-

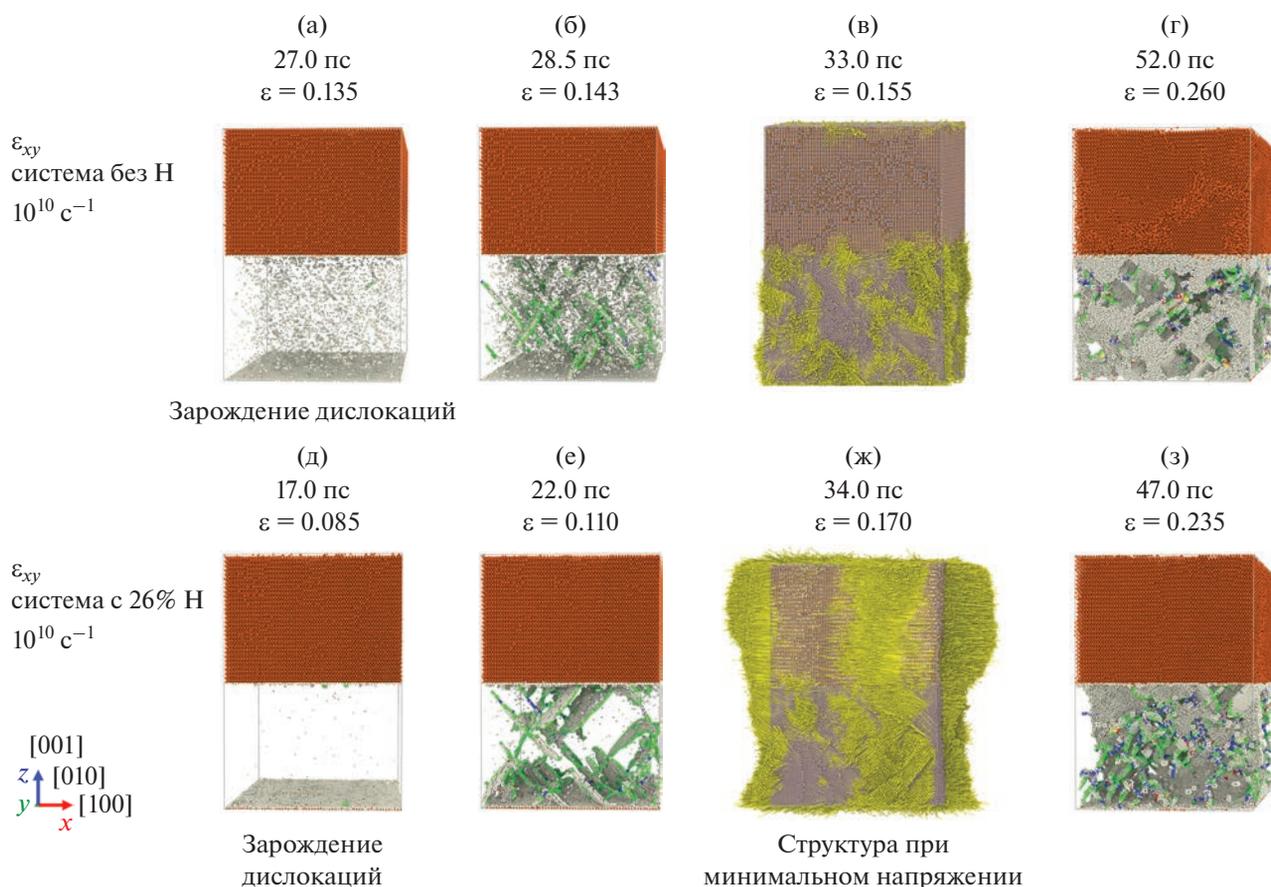


Рис. 8. Стадии развития пластической деформации в малом бикристалле: ϵ_{xy} -деформация; а–г – система без водорода, д–з – система с водородом, скорость деформации 10^{10} c^{-1} , $T = 300 \text{ K}$. На вкладках (а, б, г, д, е, з) показаны атомы меди (оранжевые точки on line), атомы алюминия, центральносимметричный параметр которых превосходит 5 (серые точки) и дислокационные сегменты (зеленые, синие, красные линии on line). На вкладках (в, ж) показаны все атомы системы и вектора их смещений из начального положения, видно, что в случае с водородом (ж) пластическая деформация развивается в объеме θ' .

щенных атомов. На 40 пс напряжения достигают минимальных значений 0.96 ГПа. Дальнейшая деформация ведет к активному пластическому течению в обеих частях системы (рис. 8г), приводящему к искажению межфазной границы и всей структуры бикристалла.

С добавлением водорода в слой θ' пластическое течение в системе начинается раньше, зарождение дислокаций на межфазной границе происходит в момент 17 пс (рис. 8д). Развитие пластической деформации в слое θ' начинается с момента 22 пс (рис. 8е), до этого в системе наблюдаются максимальные напряжения 5.4 ГПа. В сравнение с системой без водорода деформация в слое θ' при добавлении водорода происходит более хаотично (см. рис. 8ж и 8з), что связано со значительным понижением стойкости материала θ' к сдвигу. Минимальные напряжения в системе зарегистрированы на 34 пс и соответствуют 1.1 ГПа.

2. Скорость деформации $5 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$

При снижении скорости деформации до $5 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$ (в 20 раз) наблюдается та же тенденция к снижению напряжений в системе при добавлении атомов водорода (см. табл. 1). Зависимости напряжения от времени при обеих скоростях деформации имеют схожий вид, в системах наблюдаются аналогичные механизмы перехода от упругой деформации к пластической.

В случае системы без водорода происходит практически одновременная активация испускания дислокаций с межфазной границы и проскальзывание обеих межфазных границ (рис. 9); зарождение дислокаций начинается в момент времени 373 пс (рис. 9а) при напряжении около 6 ГПа. При дальнейшей деформации наблюдается увеличение плотности дислокаций в объеме алюминия вплоть до момента 376 пс, после чего дисло-

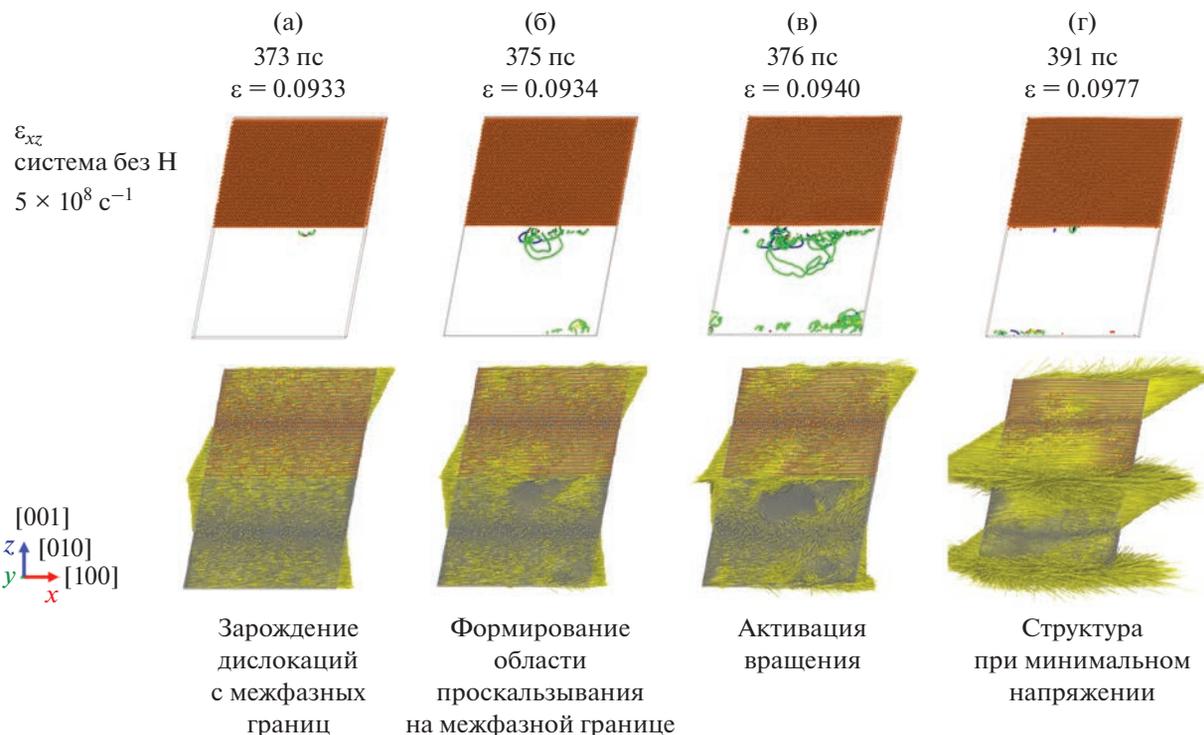


Рис. 9. Стадии развития пластической деформации в малом бикристалле: ϵ_{xz} -деформация, система без водорода, скорость деформации $5 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$, $T = 300 \text{ K}$. В верхней части рисунка показаны атомы меди (оранжевые точки on line) и дислокационные сегменты (зеленые, синие и красные линии on line). В нижней части рисунка показаны все атомы системы и вектора их смещений из начального положения. а–г – разные стадии деформации.

кации аннигилируют и поглощаются аморфным слоем атомов. Дальнейшая деформация осуществляется преимущественно посредством поворота частей системы при проскальзывании границ.

Для системы с водородом (рис. 10) пластическое течение активируется формированием дислокаций на межфазной границе на момент 297 пс (рис. 10а) при напряжении 3.4 ГПа. Возникновение первых дислокаций на межфазных границах стимулирует образования аморфного слоя атомов. В этом случае разрыв векторов смещений возникает только на одной межфазной границе, вдоль которой и осуществляется проскальзывание частей системы. Развитие скольжения по межфазной границе подавляет дислокационный механизм пластичности.

На рис. 11 изображены стадии развития пластической деформации при ϵ_{xy} -деформации для бикристалла малого размера и скорости деформации $5 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$. Здесь видно, что для системы с водородом дислокации начинают зарождаться с нижней межфазной границы, и активация пластического течения происходит раньше, на 326 пс (рис. 11е). Для системы без водорода пластиче-

ское течение активируется на 503 пс (рис. 11б). При добавлении водорода в систему в структуре θ' после активации пластического течения практически сразу происходит нарушение идеальной кристаллической структуры. Для системы без водорода идеальная кристаллическая структура слоя θ' сохраняется значительно дольше. Максимальные напряжения для системы без водорода составляют 7.5 ГПа, для системы с водородом – 6 ГПа.

3. Влияние температуры

В случае ϵ_{xy} -деформации (см. рис. 2) провалы в напряжениях до отрицательных значений на графике зависимости от времени деформации не наблюдаются ввиду отсутствия проскальзывания на межфазных границах в системе и последующего поворота частей бикристалла. Для ϵ_{xz} -деформации в случае систем без водорода (см. рис. 2) на графике наблюдаются провалы в напряжениях до отрицательных значений. Установлено, что провалы в напряжениях сохраняются для всех рассмотренных температур. Это связано с тем, что даже при повышении температуры механизмы

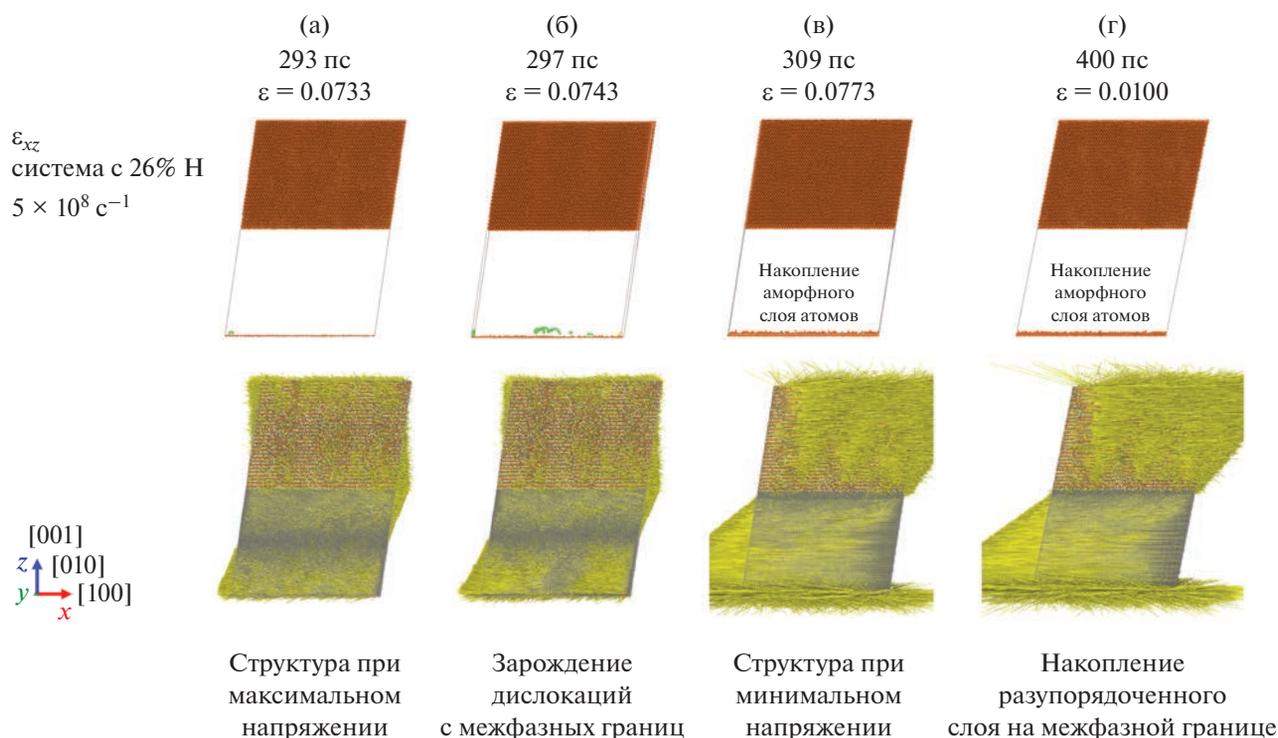


Рис. 10. Стадии развития пластической деформации в малом бикристалле: ε_{xz} -деформация, система с 26% концентрацией Н, скорость деформации $5 \times 10^8 \text{ с}^{-1}$, $T = 300 \text{ К}$. В верхней части рисунка показаны атомы меди (оранжевые точки on line) и дислокационные сегменты (зеленые линии on line). В нижней части рисунка показаны все атомы системы и вектора их смещений из начального положения. а–г – разные стадии деформации.

пластической деформации сохраняются. Снижение критических напряжений с увеличением температуры укладывается с хорошей точностью на линейную зависимость (см. рис. 3). Средний коэффициент температурной чувствительности, оцененный по МД-данным, равен -4 МПа/К .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярной динамики проведено исследование механизмов пластической деформации, возникающих при сдвиговой деформации в Al/ θ' -бикристаллах в отсутствие водорода и с насыщенным водородом слоем θ' -фазы. Для каждого состояния рассмотрены два размера систем и два направления сдвига $[100](001)_{\text{Al}}$ и $[100](010)_{\text{Al}}$. Характер пластической деформации при сдвиге в значительной мере зависит от направления деформации, а наличие водорода понижает величину критических напряжений активации пластической релаксации, сохраняя основной механизм пластической деформации.

При ε_{xz} -деформации системы без водорода пластическая релаксация активируется при формировании дислокационных петель в алюминии на межфазной границе при напряжении 6.4 ГПа.

Появление дефектов на межфазной границе приводит к формированию разупорядоченного слоя атомов вблизи межфазных границ, вдоль которого осуществляется проскальзывание и поворот частей системы. В случае системы, не содержащей водорода, дальнейшая пластическая релаксация осуществляется также за счет дислокационного механизма, проскальзывания вдоль межфазных границ и разориентировки кристаллитов. Присутствие водорода в объеме слоя θ' , приводит к более раннему зарождению дислокаций вблизи межфазной границы в силу снижения стойкости материала θ' к сдвигу. Активация пластического течения происходила при напряжении 4 ГПа. Зарождение дислокаций провоцирует межфазное проскальзывание, скорость которого оказывается достаточной для эффективного снятия напряжений, в результате чего пластическая релаксация в дальнейшем развивалась за счет межфазного скольжения. При деформации ε_{xz} наблюдается поворот каждой части системы на угол 5° против часовой стрелки как для системы без водорода, так и для системы с водородом.

При ε_{xy} -деформации пластическая релаксация происходит за счет генерации и последующего скольжения дислокаций в алюминии, а также

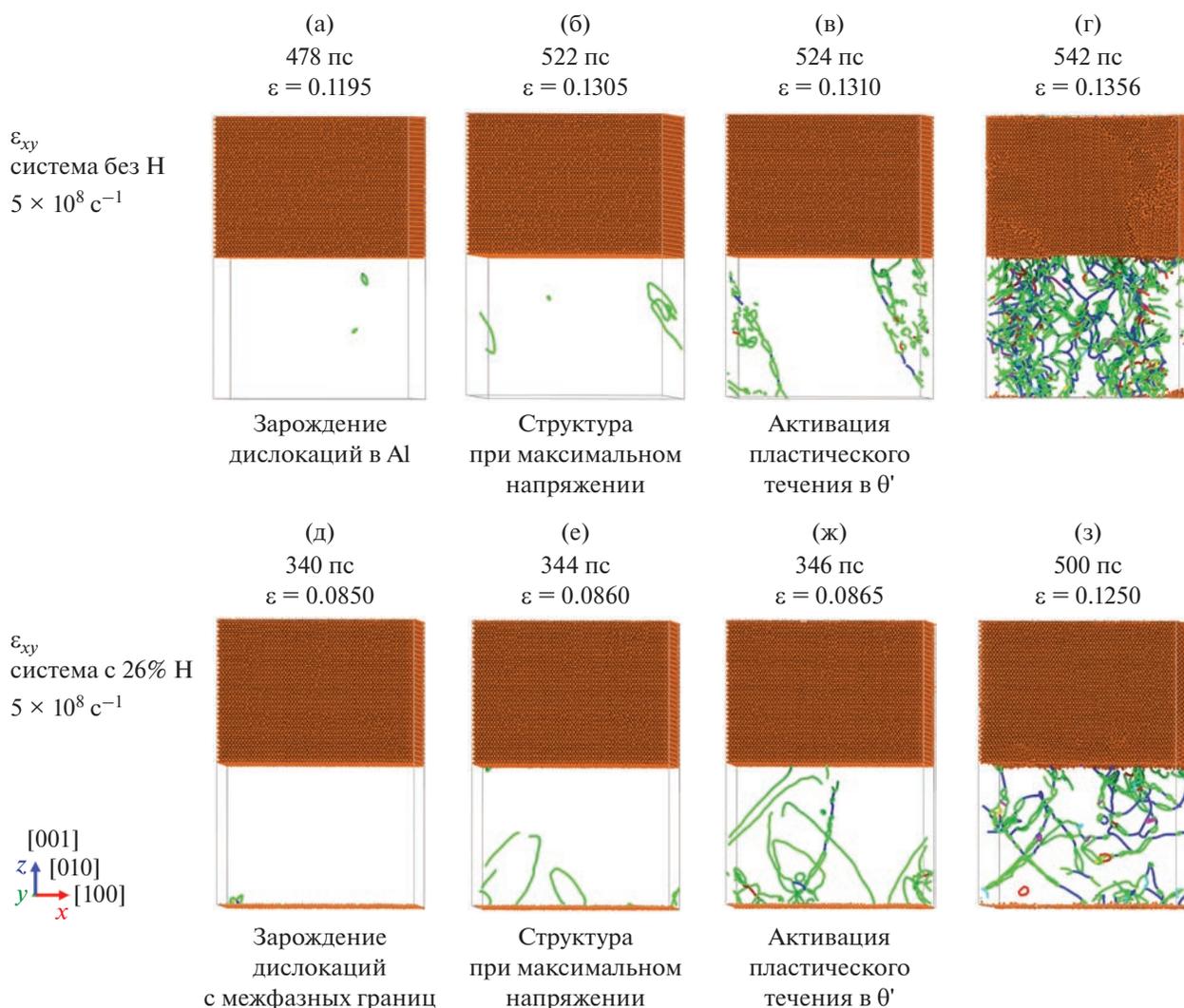


Рис. 11. Стадии развития пластической деформации в малом бикристалле: ϵ_{xy} -деформация. а–г – система без водорода, д–з – с водородом, скорость деформации $5 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$. Показаны атомы меди (оранжевые точки on line) и дислокационные сегменты (зеленые, синие и красные линии on line).

пластической релаксации в материале θ' , имеющей не дислокационную природу. Введение водорода в систему приводит к существенному понижению величины критических напряжений от 7.5 до 5.5 ГПа. Это связано с более низкой стойкостью материала θ' -фазы к сдвигу. Насыщенный водородом слой θ' демонстрировал более раннее нарушение кристаллической структуры при деформации.

Увеличение толщины алюминиевой прослойки в два раза не сказывается на величине критических напряжений и механизмах пластической релаксации. Понижение скорости деформации в 20 раз приводит к уменьшению пороговых напряжений для систем без водорода на 5%. Слабую скоростную чувствительность алюминиевого

сплава ранее фиксировали в эксперименте на динамический сдвиг [44]. Системы, содержащие водород, демонстрируют большую чувствительность к скорости деформации, для них снижение напряжений составляет 20%. Нагрев системы приводит к понижению критических напряжений с температурной чувствительностью -4 МПа/К .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 18-71-10038.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Johnson W.H. On some remarkable changes produced in iron and steel by the action of hydrogen and acids // Nature. 1875. V. 11. № 281. P. 393.

2. Merrick R.D. An overview of hydrogen damage to steel at low temperature // Mater. Perform. 1989. V. 28. P. 53–55.
3. Safyari M., Moshtaghi M., Kuramoto S. Environmental hydrogen embrittlement associated with decohesion and void formation at soluble coarse particles in a cold-rolled Al–Cu based alloy // Mater. Sci. Eng. A. 2021. V. 799. P. 139850.
4. Su H., Toda H., Shimizu K., Uesugi K., Takeuchi A., Watanabe Y. Assessment of hydrogen embrittlement via imagebased techniques in Al–Zn–Mg–Cu aluminum alloys // Acta Mater. 2019. V. 176. P. 96–108.
5. Tsuru T., Shimizu K., Yamaguchi M., Itakura M., Ebihara K., Bendo A., Matsuda K., Toda H. Hydrogen-accelerated spontaneous microcracking in high-strength aluminium alloys // Sci. Rep. 2020. V. 10. P. 1998.
6. Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Горностырев Ю.Н. Зернограничное проскальзывание по специальным асимметричным границам зерен в бикристаллах Al. Атомистическое молекулярно-динамическое моделирование // Физика металлов в металловедении. 2021. Т. 122. № 11. С. 1187–1195.
7. Hua A., Zhao J. Shear direction induced transition mechanism from grain boundary migration to sliding in a cylindrical copper bicrystal // Int. J. Plast. 2022. V. 156. P. 103370.
8. Yao B.N., Liu Z.R., Legut D., Kong X.F., Germann T.C., Zhang H.J., Zhang R.F. Cooperative roles of stacking fault energies on dislocation nucleation at bimetal interface through tunable potentials // Comput. Mater. Sci. 2021. V. 193. P. 110416.
9. Волков А.Ю., Калонов А.А., Завалишин В.А., Глухов А.В., Комкова Д.А., Антонов Б.Д. Влияние интерфейсов на физико-механические свойства Cu/Mg-компози́тов // Физика металлов в металловедении. 2020. Т. 121. № 6. С. 628–634.
10. Shayanpoor A.A., Rezaei Ashtiani H.R. Microstructural and mechanical investigations of powder reinforced interface layer of hot extruded Al/Cu bimetallic composite rods // J. Manuf. Process. 2022. V. 77. P. 313–328.
11. Kim I.K., Hong S. Effect of heat treatment on the bending behavior of tri-layered Cu/Al/Cu composite plates // Mater. Des. 2013. V. 47. P. 590–598.
12. Han J., Li S., Gao X., Huang Z., Wang T., Huang Q. Effect of annealing process on interface microstructure and mechanical property of the Cu/Al corrugated clad sheet // J. Mater. Res. Technol. 2023. V. 23. P. 284–299.
13. Sas-Boca I.M., Pluțiu-Varvara D.A., Tintelecan M., Aciu C., Frunzã D.I., Popa F. Studies on Hot-Rolling Bonding of the Al–Cu Bimetallic Composite // Materials. 2022. V. 15. № 24. P. 8807.
14. Krasnikov V.S., Mayer A.E. Initiation and Mechanisms of Plasticity in Bimetallic Al–Cu Composite // Metals. 2023. V. 13. № 1. P. 102.
15. Zhang J., Ma A., Wang J., Liu C., Xie J., Jia Y. Grain boundary heredity from Cu/Al solid–liquid interface via diffusion during the solidification processes // Chem. Phys. 2022. V. 552. P. 111369.
16. Bourgeois L., Dwyer C., Weyland M., Nie J.-F., Muddle B.C. Structure and energetics of the coherent interface between the θ' precipitate phase and aluminium in Al–Cu // Acta Mater. 2011. V. 59. № 18. P. 7043–7050.
17. Gazizov M.R., Boev A.O., Marioara C.D., Andersen S.J., Holmestad R., Kaibyshev R.O., Aksyonov D.A., Krasnikov V.S. The unique hybrid precipitate in a peak-aged Al–Cu–Mg–Ag alloy // Scr. Mater. 2021. V. 194. P. 113669.
18. Шуркин П.К., Акоюян Т.К., Лелягин Н.В. Влияние микродобавки индия на структуру и упрочнение бинарных Al–Cu-сплавов // Физика металлов в металловедении. 2021. Т. 122. № 8. С. 866–872.
19. Ma Z., Zhan L., Liu C., Xu L., Xu Y., Ma P., Li J. Stress-level-dependency and bimodal precipitation behaviors during creep ageing of Al–Cu alloy: Experiments and modeling // Int. J. Plast. 2018. V. 110. P. 183–201.
20. Krasnikov V.S., Mayer A.E. Dislocation dynamics in aluminum containing θ' -phase: Atomistic simulation and continuum modeling // Int. J. Plast. 2019. V. 119. P. 21–42.
21. Krasnikov V.S., Mayer A.E., Pogorelko V.V., Gazizov M.R. Influence of θ' Phase Cutting on Precipitate Hardening of Al–Cu Alloy during Prolonged Plastic Deformation: Molecular Dynamics and Continuum Modeling // Appl. Sci. 2021. V. 11. № 11. P. 4906.
22. Krasnikov V.S., Gazizov M.R., Mayer A.E., Bezborodova P.A., Pogorelko V.V., Kaibyshev R.O. Prediction of the strength of aged Al–Cu alloys with non-hybrid and hybrid $\{100\}$ Al plates // Comput. Mater. Sci. 2022. V. 207. P. 111331.
23. Adlakha I., Garg P., Solanki K.N. Revealing the atomistic nature of dislocation-precipitate interactions in Al–Cu alloys // J. Alloys Compd. 2019. V. 797. P. 325–333.
24. Zhang P., Bian J.J., Zhang J.Y., Liu G., Weiss J., Sun J. Plate-like precipitate effects on plasticity of Al–Cu alloys at micrometer to sub-micrometer scales // Mater. Des. 2020. V. 188. P. 108444.
25. Liu G., Wang S., Misra A., Wang J. Interface-mediated plasticity of nanoscale Al–Al₂Cu eutectics // Acta Mater. 2020. V. 186. P. 443–453.
26. Krasnikov V.S., Bezborodova P.A., Mayer A.E. Effect of hydrogen accumulation on θ' precipitates on the shear strength of Al–Cu alloys // Int. J. Plast. 2022. V. 159. P. 103475.
27. Krasnikov V.S., Mayer A.E., Pogorelko V.V. Prediction of the shear strength of aluminum with θ phase inclusions based on precipitate statistics, dislocation and molecular dynamics // Int. J. Plast. 2020. V. 128. P. 102672.
28. Krasnikov V.S., Mayer A.E., Pogorelko V.V., Gazizov M.R. Influence of θ' -phase cutting on precipitate hardening of al–cu alloy during prolonged plastic deformation: molecular dynamics and continuum modeling // Appl. Sci. 2021. V. 11. P. 4906.
29. Kanel G.I., Zaretsky E.B., Razorenov S.V., Ashitkov S.I., Fortov V.E. Unusual plasticity and strength of metals at ultra-short load durations // Phys. Usp. 2017. V. 60. P. 490–508.

30. Zuanetti B., McGrane S.D., Bolme C.A., Prakash V. Measurement of elastic precursor decay in pre-heated aluminum films under ultra-fast laser generated shocks // *J. Appl. Phys.* 2018. V. 123. № 19. P. 195104.
31. Majchrzak E., Poteralska J. Numerical-analysis-of-short-pulse-laser-interactions-with-thin-metal-film // *Archives of foundry eng.* 2010. V. 10. P. 123–128.
32. Путилин В.А., Камашев А.В. Формирование упрочненного слоя в хромистых сталях при обработке короткоимпульсным лазерным излучением // *Известия Самарского научного центра Российской академии наук.* 2018. Т. 20. № 4–2. С. 290–292.
33. Ромашевский С.А., Ашитков С.И., Агранат М.Б. Фемтосекундная лазерная технология обработки твердотельных материалов: создание функциональных поверхностей и селективная модификация наноразмерных слоев // *Теплофизика высоких температур.* 2018. Т. 56. № 4. С. 609–630.
34. Kumar P., Garg P., Solanki K.N., Adlakha I. Effect of hydrogen on the ideal shear strength in metals and its implications on plasticity: A first-principles study // *Int. J. Hydrog. Energy.* 2021. V. 46. № 50. P. 25726–25737.
35. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comput. Phys.* 1995. V. 117. P. 1–19.
36. Zhou X.W., Ward D.K., Foster M.E. A bond-order potential for the Al–Cu–H ternary system // *New J. Chem.* 2018. V. 42. P. 5215–5228.
37. Meng X., Leng X., Shan C., Zhou L., Zhou J., Huang S., Lu J. Vibration fatigue performance improvement in 2024-T351 aluminum alloy by ultrasonic-assisted laser shock peening // *Int. J. Fatigue.* 2023. V. 168. P. 107471.
38. Nakamura M., Takahashi K., Saito Y. Effect of Shot and Laser Peening on Fatigue Strength of Additively Manufactured Aluminum Alloy with Rough Surfaces // *J. Mater. Eng. Perform.* 2023. V. 32. № 4. P. 1589–1600.
39. Li B., Qin Z., Zhang H., Xue H. The effects of laser peening treatment on the very high cycle fatigue properties for AA2024-T351 alloy using a crystal plasticity framework // *Eng. Fract. Mech.* 2022. V. 275. P. 108840.
40. Hirel P. Atomsk: a tool for manipulating and converting atomic data files // *Comput. Phys. Commun.* 2015. V. 197. P. 212–219.
41. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 2009. V. 18. № 1. P. 015012.
42. Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // *Model. Simulat. Mater. Sci. Eng.* 2012. V. 20. P. 085007.
43. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // *Phys. Rev. B.* 2012. V. 85. P. 11085.
44. Kuzmin V.A., Galiev F.F., Pushkov V.A., Sherstobitov E.S., Koshatova E.V., Gerasimov S.I., Mishustin A.T. A Study of the Deformation of a Low-Density Aluminum–Lithium Alloy under Impact Compression and Localized Shear // *Physics of Metals and Metallography.* 2022. V. 123. № 10. P. 1017–1023.