

УДК 539.5

Краткое сообщение

Динамическое торможение дислокаций в состаренных алюминиевых сплавах в условиях лазерного облучения

В.В. Малашенко

ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»

283114, Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

malashenko@donfti.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.679

Аннотация: Теоретически проанализировано надбарьерное скольжение дислокаций под действием лазерных импульсов в состаренных алюминиевых сплавах, содержащих наноразмерные дефекты (зоны Гинье-Престона). Для решения поставленной задачи использовалась теория динамического взаимодействия дефектов. Получены аналитические выражения зависимости динамического предела текучести от концентрации атомов меди и плотности дислокаций в состаренном алюминиевом сплаве. Проанализированы условия возникновения экстремумов функций, описывающих зависимость динамического предела текучести алюминиевого сплава от концентрации атомов меди и плотности дислокаций. Проведенный анализ подтверждает выводы теории динамического взаимодействия дефектов об условиях возникновения немонотонных зависимостей механических свойств металлов и сплавов от концентрации структурных дефектов. Максимум имеет место в точке, где происходит смена главного вклада в формирование спектральной щели. Минимум находится в точке, где сменяется главный вклад в динамическое торможение дислокаций. Показано, что для возникновения двух экстремумов этих зависимостей важную роль играют наноразмерные дефекты (зоны Гинье-Престона). Существование и положение экстремумов определяется конкуренцией взаимодействия движущейся дислокации с другими дислокациями ансамбля, атомами меди и зонами Гинье-Престона. Выполнены численные оценки объёмной концентрации зон Гинье-Престона, при которой возможно существование двух экстремумов. Согласно оценкам величина концентрации зон Гинье-Престона составляет 10^{23} - 10^{24} м⁻³.

Ключевые слова: *высокоскоростная деформация, дислокации, зоны Гинье-Престона, точечные дефекты, наноматериалы.*

1. Введение

Алюминиевые сплавы находят широкое применение в промышленности, в частности, в авиастроении [1, 2]. Для улучшения механических свойств их подвергают естественному или искусственному старению. В результате на первой стадии старения происходит образование зон Гинье-Престона. В медно-алюминиевом сплаве зона Гинье-Престона представляет собой диск обычно моноатомной толщины и радиусом от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров, состоящий из атомов меди. Взаимодействуя с движущимися дислокациями и препятствуя их перемещению по кристаллу, эти зоны оказывают существенное влияние на формирование механических свойств сплава. При обработке заготовок из алюминиевого сплава всё чаще применяются лазерные технологии, отличающиеся повышенной точностью, высокой

скоростью и минимальным количеством отходов. Если мощность лазерного импульса превышает 10^7 - 10^8 Вт/см², кинетическая энергия дислокации превышает высоту потенциальных барьеров, создаваемых структурными дефектами. Дислокация в этом случае совершает надбарьерное скольжение, преодолевая структурные дефекты динамическим образом без помощи тепловых флуктуаций. Реализуется высокоскоростная деформация кристалла, которая существенным образом отличается от квазистатической деформации, поскольку механизм диссипации претерпевает существенные изменения, а роль эффектов коллективного взаимодействия структурных дефектов с дислокацией значительно возрастает [3-5]. При высокоскоростной деформации характер влияния структурных дефектов, в частности зон Гинье-Престона, на движение дислокаций и формирование механических свойств имеет существенные особенности. При этом характер влияния различных дефектов и условий деформирования на величину силы динамического торможения имеет некоторые общие закономерности. Соответственно общие закономерности имеют и зависимости механических свойств, в частности, динамического предела текучести, от концентрации различных дефектов. Анализ этих закономерностей и посвящена настоящая работа.

2. Постановка задачи и результаты

Проанализировать общие черты формирования концентрационных зависимостей механических свойств позволяет теория динамического взаимодействия дефектов (ДВД) [6-8].

Пусть внешнее сдвиговое напряжение σ_{xy}^0 приводит в движение ансамбль бесконечных краевых дислокаций в плоскостях скольжения параллельных XOZ . Дислокации движутся с постоянной скоростью v в алюминиевом сплаве, содержащем атомы меди и состоящие из этих атомов зоны Гинье-Престона, хаотически распределённые в плоскостях параллельных плоскостям дислокационного скольжения. Линии дислокаций параллельны оси OZ , их векторы Бюргерса параллельны оси OX .

Уравнение движения k -ой дислокации имеет вид

$$m \left\{ \frac{\partial^2 S_k}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 S_k}{\partial z^2} \right\} = b \left[\sigma_{xy}^{Cu} + \sigma_{xy}^G + \sigma_{xy}^{dis} + \sigma_{xy}^0 \right] - B \frac{\partial S_k}{\partial t}. \quad (1)$$

Здесь m – масса единицы длины дислокации, $S_k(z, t)$ – функция, определяющая положение k -ой дислокации ансамбля, b – модуль вектора Бюргерса дислокации, c – скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле, σ_{xy}^{Cu} – компонента тензора напряжений, создаваемых на линии k -й дислокации атомами меди, σ_{xy}^G – создаваемых там же зонами

Гинье-Престона, σ_{xy}^{dis} – создаваемых другими дислокациями, B – константа демпфирования, обусловленная фононными механизмами диссипации.

В рамках теории ДВД сила динамического торможения дислокации структурными дефектами может быть вычислена по формуле

$$F_d = \frac{n_d b^2}{8\pi^2 m} \int d^3 q |q_x| \cdot |\sigma_{xy}^d(\mathbf{q})|^2 \delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_z)), \quad (2)$$

где n_d – объемная концентрация соответствующих дефектов, $|\sigma_{xy}^d(\mathbf{q})|$ – Фурье-образ компоненты тензора напряжений, создаваемых дефектом данного типа, $\omega(q_z)$ – спектр дислокационных колебаний.

Вид спектра дислокационных колебаний весьма важен при анализе надбарьерного движения дислокаций, поскольку возбуждение колебаний дислокаций является основным каналом диссипации в этой области скоростей, и эффективность торможения определяется эффективностью этого возбуждения, которая в свою очередь зависит от вида дислокационного спектра, прежде всего от наличия в нём щели, ограничивающей амплитуду колебаний. Наличие щели означает, что дислокация колеблется в потенциальной параболической яме, перемещающейся по кристаллу вместе с дислокацией. Эта подвижная параболическая яма чаще всего возникает в результате коллективного взаимодействия с движущейся дислокацией точечных дефектов либо коллективного взаимодействия с ней других дислокаций ансамбля.

Теория ДВД является теорией конкурирующих взаимодействий. Механические свойства кристаллов в значительной мере определяются силой динамического торможения. Эта сила состоит из суммы вкладов отдельных дефектов, конкуренция которых определяется в первую очередь их концентрациями. Вклад каждого типа дефектов зависит от вида спектра, в первую очередь от вида спектральной щели. Вид щели также определяется конкуренцией различного типа дефектов. Эти два типа конкуренции определяют появление экстремумов на зависимостях механических свойств от структурных дефектов.

Наличие наноразмерных дефектов в кристалле, таких, как зоны Гинье-Престона, приводит к возникновению дополнительных экстремумов на таких зависимостях. Воспользовавшись результатами теории ДВД, получим зависимость динамического предела текучести алюминиевого сплава от плотности дислокаций

$$\tau = \alpha \mu b \sqrt{\rho} + \frac{n_{Cu} \mu \chi^2 \dot{\epsilon}}{\rho(\rho + \rho_0) b^3 c} + \frac{\mu n_G b R}{\sqrt{\rho + \rho_0}}. \quad (3)$$

В этом выражении первое слагаемое представляет собой тейлоровское упрочнение, второе описывает вклад атомов меди, третье – вклад зон Гинье-Престона. Здесь α – безразмерный параметр порядка единицы, μ –

модуль сдвига, ρ – плотность дислокаций, n_{Cu} – безразмерная концентрация атомов меди, χ – параметр размерного несоответствия атомов меди и алюминия, $\dot{\varepsilon}$ – скорость пластической деформации, n_G – объемная концентрация зон Гинье-Престона, R – средний радиус зоны.

Величина критической плотности дислокаций определяется выражением

$$\rho_0 = \frac{\sqrt{n_{Cu}\chi^2}}{b^2}. \quad (4)$$

Максимум этой зависимости имеет место при значениях плотности порядка ρ_0 , положение минимума определяется выражением

$$\rho_{\min} = \left(\frac{2\dot{\varepsilon}\rho_0}{\alpha c} \right)^{2/3}. \quad (5)$$

Этот результат является подтверждением вывода, сделанного ранее в рамках теории ДВД: максимум предела текучести имеет место при смене доминирующего вклада в формирование спектральной щели, минимум – при смене доминирующего вклада дефектов в полное торможение дислокаций. В рассмотренном нами случае положение максимума соответствует значению плотности дислокаций, при которой доминирующий вклад атомов меди в формирование щели сменяется доминирующим вкладом дислокаций. Минимум имеет место при переходе от доминирования динамического торможения дислокации атомами меди к доминированию торможения другими дислокациями.

Проанализируем теперь зависимость динамического предела текучести алюминиевого сплава от концентрации атомов меди. В рамках теории ДВД эта зависимость может быть представлена в следующем виде

$$\tau = \frac{n_G \mu b_0 R}{\sqrt{\rho(1 + \sqrt{n_{Cu}/n_0})}} + \frac{n_{Cu} \mu \chi^2 \dot{\varepsilon}}{(1 + \sqrt{n_{Cu}/n_0}) \rho^2 b^3 c} + \frac{B \dot{\varepsilon}}{\rho b^2}. \quad (6)$$

Величина критической концентрации атомов меди может быть описана выражением

$$n_0 = \left(\frac{\rho b^2}{\chi} \right)^2. \quad (7)$$

Представленная зависимость также подтверждает условия возникновения экстремумов, полученные ранее в рамках теории ДВД для других случаев высокоскоростной деформации. Она имеет максимум и минимум. При этом максимум имеет место при значении концентрации n_0 , т.е. в точке, где доминирующий вклад дислокаций в формирование спектральной щели сменяется доминированием вклада атомов меди. Минимум возникает при переходе от доминирования вклада зон Гинье-Престона в полную силу динамического торможения дислокаций к

доминированию вклада атомов меди. Это происходит при значении концентрации

$$n_2 = \sqrt[3]{\left(\frac{n_G b^3 R \rho c}{\dot{\varepsilon} \chi^{3/2}} \right)^4}. \quad (8)$$

Таким образом, оба рассмотренных в статье случая подтверждают выводы теории ДВД об условиях возникновения экстремумов. Отметим также, что для реализации этих условий в обоих случаях важную роль играют наноразмерные дефекты – зоны Гинье-Престона, без которых возникновение двух экстремумов было бы невозможным.

Выполним численные оценки. Для возникновения двух экстремумов зависимости динамического предела текучести от концентрации точечных дефектов при значениях $\rho = 6 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$, $\dot{\varepsilon} = 10^6 \text{ с}^{-1}$ необходима весьма высокая концентрация наноразмерных дефектов (в нашем случае зон Гинье-Престона) – $n_G = 10^{23} - 10^{24} \text{ м}^{-3}$.

3. Заключение

Анализ полученных в статье результатов позволяет сделать вывод о том, что условия возникновения экстремумов на зависимостях механических свойств функциональных материалов, сформулированные в рамках теории ДВД, являются весьма универсальными. В частности, они выполняются для такого практически важного случая, как лазерная обработка алюминиевых сплавов. Эти результаты являются подтверждением того факта, что теория ДВД, несмотря на то, что она является феноменологической и содержит ряд упрощающих допущений, адекватно отражает основные моменты высокоскоростной деформации, что позволяет использовать её для решения широкого круга задач по дислокационной динамике. Кроме того, в статье показана важная роль наноразмерных дефектов для возникновения двух экстремумов на зависимостях механических свойств, в частности, это касается зависимости динамического предела текучести от концентрации точечных дефектов и плотности дислокаций.

Полученные результаты могут быть полезными при анализе влияния лазерной обработки сплавов на их механические свойства [9].

Библиографический список:

1. **Prabhakaran, S.** Laser shock peening without coating induced residual stress distribution, wettability characteristics and enhanced pitting corrosion resistance of austenitic stainless steel / S. Prabhakaran, A. Kulkarni, G. Vasanth et al. // *Applied Surface Science*. – 2017. – V. 428. – P. 17-30. DOI: 10.1016/j.apsusc.2017.09.138.
2. **Li, P.** The life prediction of notched aluminum alloy specimens after laser shock peening by TCD / P. Li, L. Susmel, M. Ma // *International Journal of Fatigue*. – 2023. – V. 176. – Art. № 107795. DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2023.107795.

3. **Tramontina, D.** Molecular dynamics simulations of shock-induced plasticity in tantalum / D. Tramontina, E. Bringa, P. Erhart et al. // *High Energy Density Physics*. – 2014. – V. 10. – P. 9-15. DOI: 10.1016/j.hedp.2013.10.007.
4. **Lee, J.H.** High strain rate deformation of layered nanocomposites / J.H. Lee, D. Veyssset, J.P. Singer, et al. // *Nature Communications*. – 2012. – V. 3. – Art. № 1164. – 9 p. DOI: 10.1038/ncomms2166.
5. **Smith, R.F.** High strain-rate plastic flow in Al and Fe / R.F. Smith, J.H. Eggert, R.E. Rudd, et al. // *Journal of Applied Physics*. – 2011. – V. 110. – I. 12. – P. 123515-1-123515-11. DOI: 10.1063/1.3670001.
6. **Малашенко, В.В.** Влияние наноразмерных дефектов на динамический предел текучести сплавов / В.В. Малашенко, Т.И. Малашенко // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – Вып. 12. – С. 136-141. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.136.
7. **Малашенко, В.В.** Влияние плотности дислокаций на динамический предел текучести облученных металлов с гигантской магнитострикцией / В.В. Малашенко // *Физика твёрдого тела*. – 2024. – Т. 66. – Вып. 8. – С. 1403-1407. DOI: 10.61011/FTT.2024.08.58607.60.
8. **Malashenko, V.V.** Dynamic drag of edge dislocation by circular prismatic loops and point defects / V.V. Malashenko // *Physica B: Condensed Matter*. – 2009. – V. 404. – I. 21. – P. 3890-3893. DOI: 10.1016/j.physb.2009.07.122.
9. **Sabzi, H.E.** Composition and process parameter dependence of yield strength in laser powder bed fusion alloys / H.E. Sabzi, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo // *Materials & Design*. – 2020. – V. 195. – Art. № 109024. – 11 p. DOI: 10.1016/j.matdes.2020.109024.

References:

1. Prabhakaran S., Kulkarni A., Vasanth G. et al. Laser shock peening without coating induced residual stress distribution, wettability characteristics and enhanced pitting corrosion resistance of austenitic stainless steel, *Applied Surface Science*, 2017, vol. 428, pp. 17-30. DOI: 10.1016/j.apsusc.2017.09.138.
2. Li P., Susmel L., Ma M. The life prediction of notched aluminum alloy specimens after laser shock peening by TCD, *International Journal of Fatigue*, 2023, vol. 176, art. no. 107795, DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2023.107795.
3. Tramontina D., Bringa E., Erhart P. et al. Molecular dynamics simulations of shock-induced plasticity in tantalum, *High Energy Density Physics*, 2014, vol. 10, pp. 9-15. DOI: 10.1016/j.hedp.2013.10.007.
4. Lee J.H., Veyssset D., Singer J.P. et al. High strain rate deformation of layered nanocomposites, *Nature Communications*, 2012, vol. 3, art. no. 1164, 9 p. DOI: 10.1038/ncomms2166.
5. Smith R.F., Eggert J.H., Rudd R.E. et al. High strain-rate plastic flow in Al and Fe, *Journal of Applied Physics*, 2011, vol. 110, issue 12, pp. 123515-1-123515-11. DOI: 10.1063/1.3670001.
6. Malashenko V.V., Malashenko T.I. Vliyanie nanorazmernykh defektov na dinamicheskij predel tekuchesti splavov [The effect of nanoscale defects on the dynamic yield stress of alloys], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2020, issue 12, pp. 136-141. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.136. (In Russian).
7. Malashenko V.V. Influence of dislocation density on the dynamic yield strength of irradiated metals with giant magnetostriiction, *Physics of the Solid State*, 2024 vol. 66, issue 8, pp. 1346-1350. DOI: 10.61011/PSS.2024.08.59059.60.
8. Malashenko V.V. Dynamic drag of edge dislocation by circular prismatic loops and point defects, *Physica B: Condensed Matter*, 2009, vol. 404, issue 21, pp. 3890-3893. DOI: 10.1016/j.physb.2009.07.122.
9. Sabzi H.E., Rivera-Díaz-del-Castillo P.E.J. Composition and process parameter dependence of yield strength in laser powder bed fusion alloys, *Materials & Design*, 2020, vol. 195, art. no. 109024, 11 p. DOI: 10.1016/j.matdes.2020.109024.

Short Communication

Dynamic drag of dislocations in aged aluminum alloys under laser irradiation

V.V. Malashenko

Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin, Donetsk, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.679

Abstract: The above-barrier glide of dislocations under the action of laser pulses in aged aluminum alloys containing nanoscale defects (Guinier-Preston zones) is theoretically analyzed. The problem is solved using a theory of dynamic interaction of defects. Analytical expressions for the dependence of the dynamic yield strength on the concentration of copper atoms and the dislocation density in the aged aluminum alloy has been obtained. The conditions for the occurrence of extrema of the functions

describing the dependence of the dynamic yield strength of the aluminum alloy on the concentration of copper atoms and the dislocation density are analyzed. The analysis confirms the conclusions of the dynamic interaction of defects theory on the conditions for the occurrence of non-monotonic dependences of the mechanical properties of metals and alloys on the concentration of structural defects. The maximum occurs at the point where the main contribution to the formation of the spectral gap changes. The minimum is at the point where the main contribution to the dynamic drag of dislocations changes. It is shown that the nanoscale defects (Guinier-Preston zones) play an important role in the occurrence of two extrema of these dependences. The existence and position of the extrema are determined by the competition of the interaction of the moving dislocation with other dislocations of the ensemble, copper atoms and Guinier-Preston zones. Numerical estimates of the volume concentration of Guinier-Preston zones, at which the existence of two extrema is possible, are performed. According to estimates, the concentration of Guinier-Preston zones is of 10^{23} - 10^{24} m⁻³.

Keywords: high strain rate deformation, dislocations, Guinier-Preston zones, point defects, nanomaterials.

Малашенко Вадим Викторович – д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник отдела «Теория кинетических и электронных свойств нелинейных систем», ГБУ «Донецкий физико-технический институт имени А.А. Галкина»

Vadim V. Malashenko – Dr. Sc., Professor, Chief Researcher of the Department «Theory of kinetic and electronic properties of nonlinear systems», Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin

Поступила в редакцию/received: 02.09.2024; после рецензирования/reviced: 03.10.2024; принята/accepted 04.10.2024.