

УДК 548.4

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛНЫХ a -ДИСЛОКАЦИЙ В ЧИСТОМ МАГНИИ НА ОСНОВЕ ПЕРВИЧНЫХ ПРИНЦИПОВ

Т. Фан*, Л. Луо*, Л. Ма**, Б. Танг^{*,**}, Л. Пенг^{***}, В. Динг^{***}

* Университет Сянтаня, 411105 Сянтань, Китай

** Школа химии и химического машиностроения Университета Гюангкси, 530004 Наньнин, Китай

*** Национальный технический исследовательский центр создания легких сплавов Шанхайского университета Джиатонг, 200030 Шанхай, Китай
E-mails: fantouwen@hotmail.com, 11g198706@qq.com, mary1985310@163.com, tangbiyu@xtu.edu.cn, plm616@sjtu.edu.cn, wjding@sjtu.edu.cn

С использованием модели Пайерлса — Набарро и результатов расчетов на основе первичных принципов обобщенных энергий дефектов укладки в чистом магнии исследованы полные a -дислокации на базальной плоскости кристаллической решетки (0001), призматической плоскости (10 $\bar{1}$ 0) и пирамидальных плоскостях (10 $\bar{1}$ 1) и (10 $\bar{1}$ 2). Показано, что системы скольжения (10 $\bar{1}$ 1) \langle 11 $\bar{2}$ 0 \rangle и (10 $\bar{1}$ 2) \langle 11 $\bar{2}$ 0 \rangle имеют практически одинаковые энергетические барьеры обобщенной энергии дефектов укладки, которые, очевидно, больше энергетических барьеров обобщенной энергии дефектов укладки систем скольжения (0001) \langle 11 $\bar{2}$ 0 \rangle и (10 $\bar{1}$ 0) \langle 11 $\bar{2}$ 0 \rangle . Установлено, что и для краевых, и для винтовых полных дислокаций максимумы плотности дислокаций, энергии Пайерлса и напряжения дислокаций в плоскостях (10 $\bar{1}$ 0), (0001), (10 $\bar{1}$ 1), (10 $\bar{1}$ 2) увеличиваются. При этом энергия Пайерлса и напряжения полных винтовых дислокаций всегда меньше, чем в случае полных краевых дислокаций во всех системах скольжения. Дислокации на пирамидальных плоскостях (10 $\bar{1}$ 1) и (10 $\bar{1}$ 2) обладают меньшими энергиями ядра дислокации, в то время как у призматической плоскости (10 $\bar{1}$ 0) они наибольшие. Это означает, что формирование полных дислокаций на плоскости (10 $\bar{1}$ 0) затруднено.

Ключевые слова: магний, дислокация, модель Пайерлса — Набарро, обобщенная энергия дефектов укладки, напряжение Пайерлса.

Введение. В последнее время магний и его сплавы активно используются в автомобильной и авиакосмической промышленности, что обусловлено их малой массой, высокой прочностью и экологичностью [1, 2]. Однако плохие пластические свойства этих материалов вследствие гексагональной плотноупакованной структуры ограничивают их широкое применение [3]. Известно, что поперечное скольжение, пересечение дислокаций и наличие межзеренной границы оказывают существенное влияние на пластические свойства материалов [4–7]. Учет свойств винтовых полных a -дислокаций необходим при исследовании поперечного скольжения, в то время как учет свойств краевых и винтовых полных a -дислокаций очень важен при изучении пересечения дислокаций и межзеренных границ [7].

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда естествознания Китая (грант № 51071053) провинции Гюангкси (грант № 0991051), Главной лаборатории дизайна материалов и технологии подготовки провинции Хунань (грант № KF0803) и Фонда научных исследований Университета Гюангкси (грант № X071117).

© Фан Т., Луо Л., Ма Л., Танг Б., Пенг Л., Динг В., 2014

В известных работах, посвященных исследованию дислокаций чистого магния, в основном рассматриваются диссоциированные a -дислокации в базальных и призматических плоскостях, и лишь в небольшом количестве работ изучаются полные a -дислокации [4, 8]. Особенно ограничено количество исследований полных a -дислокаций в пирамидальных плоскостях $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$ в магнии, что обусловлено наличием анизотропии [9, 10]. Пластичность магния до сих пор полностью не изучена, поэтому исследование полных a -дислокаций необходимо для понимания свойств пластичности. Чтобы получить представление о формировании, перемещении и диссоциации дислокаций, нужно изучить полные a -дислокации как в базальных плоскостях, так и в призматических и пирамидальных плоскостях в магнии.

В области ядра дислокации сильные искривления формы приводят к деформации связи и ее разрушению. Таким образом, необходимо использовать квантово-механический подход. Модель Пайерлса — Набарро является одним из наиболее эффективных инструментов, применяемых при изучении дислокаций в материалах [11]. В этой модели используются как дальнее поле упругих смещений дислокации, так и квантовое описание области ее ядра на поверхности обобщенной энергии дефектов (ОЭД) укладки, или γ -поверхности [12]. ОЭД может быть вычислена точно на основе первичных принципов путем сдвига одной половины кристалла относительно другой половины [13, 14]. Модель Пайерлса — Набарро применялась для изучения свойств ядра дислокации металлов, интерметаллических соединений, ковалентных систем и минеральных веществ [15–21].

В настоящей работе с использованием модели Пайерлса — Набарро и понятия ОЭД путем вычислений на основе первичных принципов исследуются краевые и винтовые полные a -дислокации в чистом магнии включая дислокации на базальной плоскости кристаллической решетки (0001) , призматической плоскости $(10\bar{1}0)$ и пирамидальных плоскостях $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$.

1. Теоретическая модель и метод расчета. Ниже приведено описание модели Пайерлса — Набарро и метода расчета.

1.1. *Модель Пайерлса — Набарро.* Согласно модели Пайерлса — Набарро [22, 23] область неупругого смещения ограничена плоскостью скольжения, но вдали от нее применима модель линейной упругости. Дислокация трактуется как непрерывное распределение бесконечно малых дислокаций $S(x)$ — функция разупорядочения, для которой вдоль

плоскости скольжения должно выполняться условие
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dS(x)}{dx} dx = b$$
 (x —

координата вдоль направления смещения, перпендикулярного направлению линии дислокации в плоскости скольжения; b — модуль вектора Бюргерса). Восстанавливающая сила F , действующая между атомами по обе стороны поверхности раздела, уравнивается результирующим напряжением распределения дислокаций, что приводит к известному уравнению Пайерлса — Набарро

$$\frac{K}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x-x'} \left(\frac{dS(x')}{dx'} \right) dx' = \frac{K}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho(x')}{x-x'} dx' = F[S(x)],$$

где энергетический коэффициент $K(\theta)$ зависит от характерного угла θ между линией дислокации и вектором Бюргерса [15, 24]. Для гексагональных кристаллов величины K_s и K_e могут быть вычислены по формулам [10]

$$K_s = \left(\frac{1}{2} c_{44}(c_{11} - c_{12}) \right)^{1/2}, \quad K_e^b = (\bar{c}_{11} + c_{13}) \left(\frac{c_{44}(\bar{c}_{11} - c_{13})}{c_{33}(\bar{c}_{11} + c_{13} + 2c_{44})} \right)^{1/2}, \quad K_e^p = \frac{c_{11}^2 - c_{12}^2}{2c_{11}},$$

где $\bar{c}_{11} = (c_{11}c_{33})^{1/2}$; нижний индекс s соответствует винтовой дислокации, e — краевой; верхний индекс b соответствует базальной плоскости, p — призматической.

Для дислокаций на пирамидальных плоскостях $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$ аналитические выражения для K_s и K_e , учитывающие анизотропию, предложены в [9, 25]. В данной работе эти выражения не приводятся вследствие их сложности. В многочисленных работах, начиная с [12], показано, что решение уравнения Пайерлса — Набарро можно найти численно, вводя восстанавливающую силу, которая определяется как градиент энергии ОЭД γ :

$$F(S) = -\text{grad } \gamma(S).$$

Для определения функции разупорядочения дислокаций $S(x)$ в [15] предложен эффективный метод, который позднее использовался в работах [16, 18, 19, 26]. В рамках этого подхода $S(x)$ можно получить в виде

$$S(x) = \frac{b}{2} + \frac{b}{\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \arctg \frac{x - x_i}{c_i}, \quad (1)$$

где α_i , x_i , c_i — варьируемые константы. Используя (1), плотность бесконечно малых дислокаций $\rho(x)$ можно представить в виде

$$\rho(x) = \frac{dS(x)}{dx} = \frac{b}{\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \frac{c_i}{(x - x_i)^2 + c_i^2}. \quad (2)$$

Как функция $S(x)$, так и плотность $\rho(x)$ должны удовлетворять условиям нормировки, а коэффициенты α_i — условию $\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1$. Подставляя $S(x)$ в левую часть уравнения Пайерлса — Набарро, получаем восстанавливающую силу

$$F^{P-N}(x) = \frac{Kb}{2\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \frac{x - x_i}{(x - x_i)^2 + c_i^2}.$$

Варьируемые константы α_i , x_i , c_i получаются путем минимизации квадрата разности между силой F^{P-N} и восстанавливающей силой F , вычисленной на основе первичных принципов. Чтобы описать разупорядочение $S(x)$ простого энергетического барьера, достаточно выбрать значение $N = 3$ в уравнении (2).

Энергия Пайерлса определяется как максимальная амплитуда изменения энергетической функции разупорядочения на плоскости скольжения. Эта энергия является суммой локальных энергий разупорядочения атомных плоскостей, параллельных линии дислокации [7], и может быть вычислена по формуле [15, 22, 27]

$$W(u) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \gamma[S(ma' - u)]a',$$

где a' — период W , выбранный в качестве кратчайшего расстояния между двумя эквивалентными атомными плоскостями в направлении смещения дислокации; m соответствует каждой рассматриваемой атомной плоскости. Тогда напряжение на поверхности раздела связано с энергетической функцией $W(u)$ и определяется следующим образом:

$$\sigma(u) = \frac{1}{b} \frac{dW(u)}{du}.$$

Максимум этой функции напряжений на границе раздела представляет собой напряжение Пайерлса, которое является минимальным напряжением, необходимым для перемещения дислокации. Другой величиной, представляющей интерес, является энергия ядра $W_{a'/2}$, соответствующая минимуму несовпадения энергетической функции. Эта величина соот-

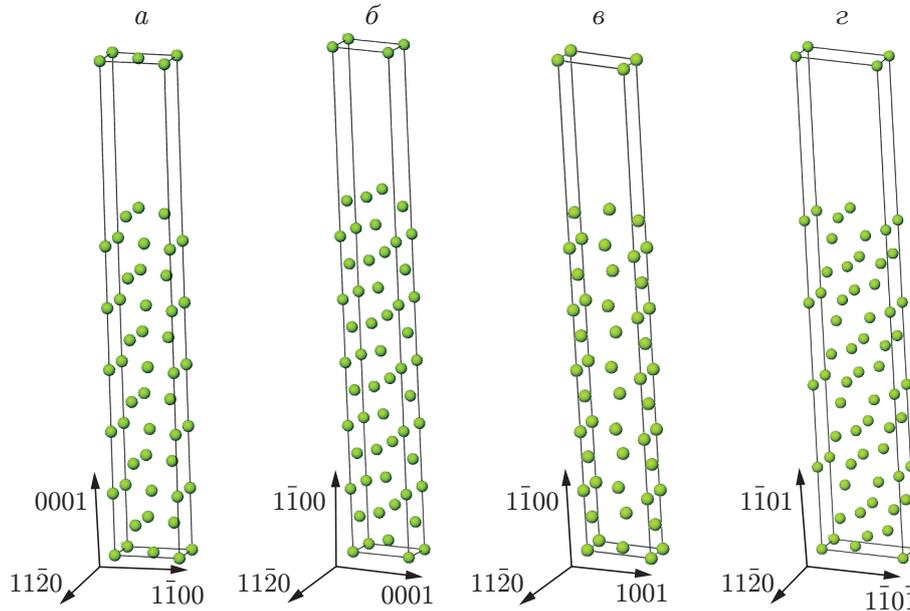


Рис. 1. Суперклетки, использованные для вычисления ОЭД чистого магния для базальной плоскости кристаллической решетки (0001) (а), призматической плоскости (10 $\bar{1}$ 0) (б) и пирамидальных плоскостей (10 $\bar{1}$ 1) (в) и (10 $\bar{1}$ 2) (г); стрелки — кристаллические направления

ветствует неупругой части энергии дислокации и дает количественную оценку энергии ее ядра [28, 29].

1.2. *Метод расчета.* Расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности с использованием вычислительного пакета Viennaabinitio, основанного на атомно-молекулярной динамике [30]. При исследовании взаимодействия валентностей ядра использовались потенциалы проектора присоединенных волн [31], для описания обменно-корреляционного функционала применялся подход, предложенный в работе [32]. В приведенных расчетах энергия обрезки базиса плоской волны была принята равной 350 эВ. Зона Бриллюэна выбиралась с помощью γ -центрированных сеток [33]. Использовалась суперклетка размером $1 \times 1 \times 12$ с вакуумной областью размером приблизительно 10 Å, расположенной между периодически повторяющимися полосками. На рис. 1 показаны структурные модели, применяемые для вычисления ОЭД чистого магния для различных систем скольжения (стрелки — базисные векторы суперклетки). Для вычисления полных энергий соответствующих суперклеток использовались различные k -точки. После проведения тестовых расчетов была выбрана сетка размером $15 \times 9 \times 1$ k -точек для базальной системы скольжения (0001)(11 $\bar{2}$ 0) и призматической системы скольжения (10 $\bar{1}$ 0)(11 $\bar{2}$ 0), сетка размером $15 \times 6 \times 1$ k -точек была применена для пирамидальных систем скольжения (10 $\bar{1}$ 1)(11 $\bar{2}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 2)(11 $\bar{2}$ 0). В процессе моделирования все атомы могли релаксировать вдоль направления, перпендикулярного плоскости скольжения. Тесты сходимости по этим параметрам показали, что значение погрешности для полной энергии составляет менее 1 мэВ/атом.

Обобщенная энергия дефектов укладки γ ОЭД определялась как разность полных энергий двух суперклеток, построенных для моделирования дефектов с $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ и $\mathbf{u} \neq \mathbf{0}$ [26], и вычислялась по формуле

$$\gamma_{\text{ОЭД}} = [E(\mathbf{u}) - E(0)]/A,$$

где $E(\mathbf{u})$ — полная энергия суперклетки с вектором дефекта \mathbf{u} ; $E(0)$ — энергия совершенной решетки; A — площадь плоскости дефектов.

Таблица 1

Значения энергетического коэффициента K для винтовых и краевых дислокаций
в различных плоскостях скольжения гексагонально упакованного металлического магния

Дислокация	K , ГПа			
	(0001)	(10 $\bar{1}0$)	(10 $\bar{1}1$)	(10 $\bar{1}2$)
Винтовая	18,58	18,58	18,58	18,58
Краевая	26,34	27,32	27,65	27,10

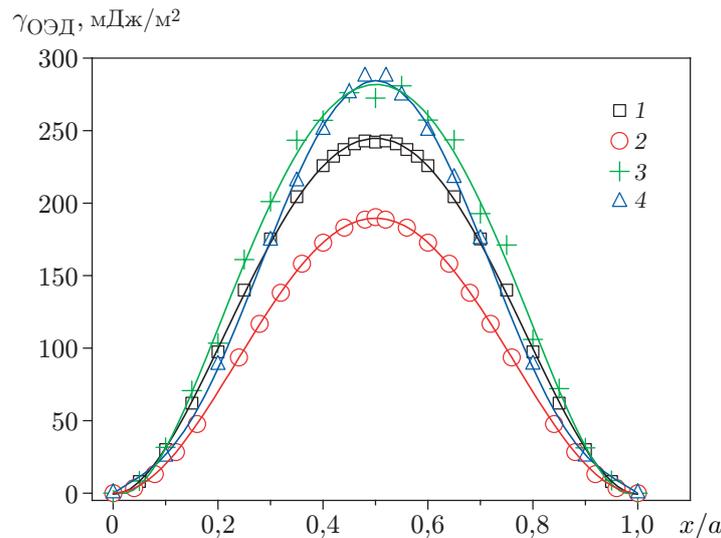


Рис. 2. Расчетные значения ОЭД для различных систем скольжения при $b = a = 3,19 \text{ \AA}$:
1 — (0001) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle , 2 — (10 $\bar{1}0$) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle , 3 — (10 $\bar{1}1$) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle , 4 — (10 $\bar{1}2$) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle

2. Результаты исследования и их обсуждение. Вычислены константы равновесной кристаллической решетки и упругие постоянные для чистого магния: $a = 3,19 \text{ \AA}$, $c = 5,19 \text{ \AA}$, $c_{11} = 63,71 \text{ ГПа}$, $c_{33} = 61,81 \text{ ГПа}$, $c_{12} = 24,05 \text{ ГПа}$, $c_{13} = 21,33 \text{ ГПа}$, $c_{44} = 17,41 \text{ ГПа}$, $c_{66} = 19,83 \text{ ГПа}$. Эти значения хорошо согласуются с результатами теоретических расчетов и экспериментальными данными [34–36]. Кроме того, с использованием упругих постоянных вычислены энергетические коэффициенты для всех четырех систем скольжения (табл. 1). Следует отметить, что для всех этих систем значение энергетического коэффициента винтовых дислокаций одно и то же: $K = 18,58 \text{ ГПа}$, в то время как энергетические коэффициенты краевых дислокаций для плоскостей скольжения (0001), (10 $\bar{1}0$), (10 $\bar{1}1$), (10 $\bar{1}2$) незначительно различаются.

2.1. ОЭД и восстанавливающая сила. Для исследования полных a -дислокаций в магнии были вычислены ОЭД систем скольжения (0001) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle , (10 $\bar{1}0$) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle , (10 $\bar{1}1$) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle , (10 $\bar{1}2$) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle (рис. 2). Видно, что ОЭД скольжения в базальной плоскости (0001) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle больше ОЭД скольжения в призматической плоскости (10 $\bar{1}0$) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle вдоль направления беспрепятственного скольжения [37]. Наибольшие значения ОЭД для систем скольжения (0001) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle и (10 $\bar{1}0$) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle равны 243 и 191 мДж/м² соответственно, что согласуется с известными результатами расчетов по теории функционала плотности: 256 и 218 мДж/м² [4, 35, 37], 292 мДж/м² для системы скольжения (0001) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle [8, 38]. Приведенные выше значения существенно меньше значения 355 мДж/м² для системы скольжения (0001) \langle 11 $\bar{2}0$ \rangle вдоль направления затрудненного скольжения [39]. Наибольшие значения ОЭД для си-

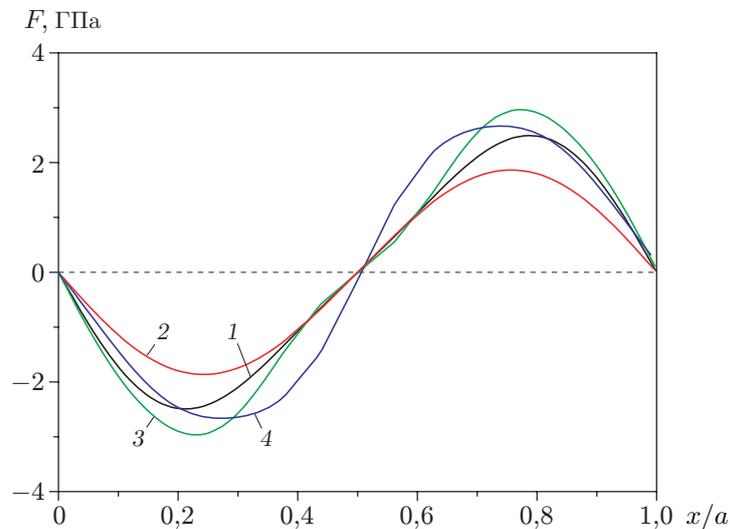


Рис. 3. Значения восстанавливающей силы, полученные на основе кривых ОЭД для различных систем скольжения:
 1 — $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$, 2 — $(10\bar{1}0)\langle 11\bar{2}0 \rangle$, 3 — $(10\bar{1}1)\langle 11\bar{2}0 \rangle$, 4 — $(10\bar{1}2)\langle 11\bar{2}0 \rangle$

стем скольжения $(10\bar{1}1)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ и $(10\bar{1}2)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ равны 280 и 290 мДж/м² соответственно. Эти значения больше энергетических барьеров ОЭД для систем скольжения $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ и $(10\bar{1}0)\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Однако ширина пика на кривой ОЭД для системы скольжения $(10\bar{1}1)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ больше, чем для системы скольжения $(10\bar{1}2)\langle 11\bar{2}0 \rangle$.

На рис. 3 показаны полученные для всех систем скольжения восстанавливающие силы, которые характеризуют градиент изменений энергии соответствующих γ -поверхностей. Небольшие отклонения от синусоидальной формы кривой наблюдаются для всех систем скольжения. Максимальные восстанавливающие силы для систем скольжения $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$, $(10\bar{1}0)\langle 11\bar{2}0 \rangle$, $(10\bar{1}1)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ и $(10\bar{1}2)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ равны 2,49, 1,91, 2,97 и 2,67 ГПа соответственно. Несмотря на то что энергетический барьер ОЭД для систем скольжения $(10\bar{1}1)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ и $(10\bar{1}2)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ практически один и тот же, максимальная восстанавливающая сила для первой системы значительно больше, чем для второй.

2.2. Дислокационные профили. Определив восстанавливающую силу на основе первичных принципов вычисления ОЭД, можно получить решение уравнения Пайерлса — Набарро [18]. С использованием значений K из табл. 1 вычислены разупорядочение дислокаций и плотность дислокаций для полных a -дислокаций в четырех плоскостях (рис. 4). Из рис. 4 следует, что максимумы плотности винтовой и краевой дислокаций в плоскостях $(10\bar{1}0)$, (0001) , $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$ увеличиваются и становятся равными 0,39, 0,48, 0,54, 0,61 и 0,27, 0,33, 0,37, 0,42 соответственно. Видно, что максимум плотности винтовых дислокаций больше максимума плотности краевых дислокаций.

Также была вычислена полуширина ζ a -дислокации, определяемая как атомное расстояние для $S(x)$, которое изменяется от $b/4$ до $3b/4$ (табл. 2). Из табл. 2 следует, что на призматической плоскости $(10\bar{1}0)$ краевая и винтовая дислокации имеют наибольшую ширину. На базальной (0001) и пирамидальной $(10\bar{1}2)$ плоскостях ширина дислокаций меньше, в то время как на пирамидальной плоскости $(10\bar{1}1)$ краевая и винтовая дислокации обладают наименьшей шириной ядра. Кроме того, для всех четырех систем скольжения полуширина винтовых дислокаций меньше полуширины краевых дислокаций. Согласно результатам исследования полуширина ζ обратно пропорциональна максимуму восстанавливающей силы F_{\max} , что согласуется с известными расчетными данными [16, 27].

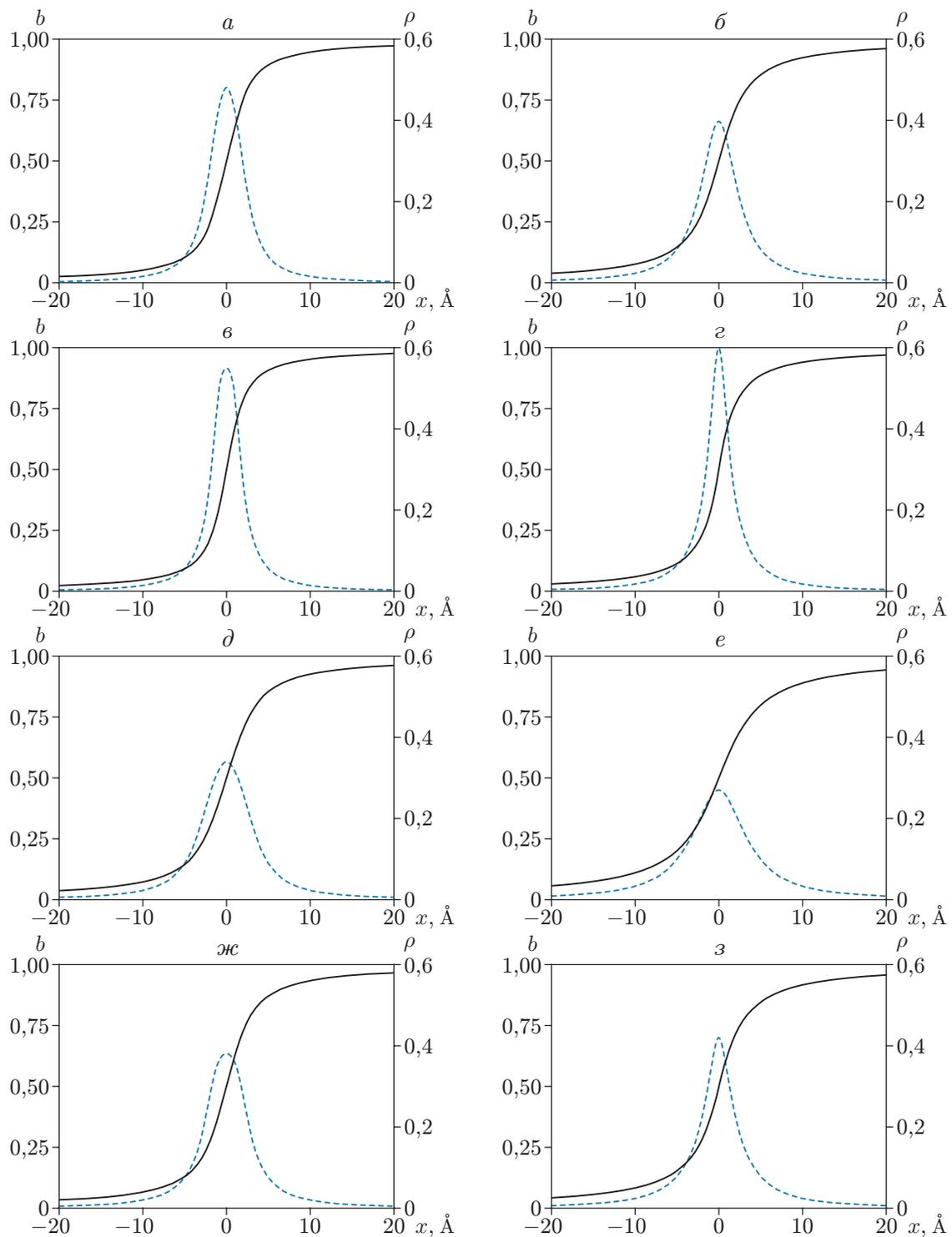


Рис. 4. Типичные профили дислокаций:

a – $г$ — винтовые дислокации (a — базальная плоскость (0001) кристаллической решетки, $б$ — призматическая плоскость ($10\bar{1}0$), $в$ — пирамидальная плоскость ($10\bar{1}1$), $г$ — пирамидальная плоскость ($10\bar{1}2$)); $д$ – $з$ — краевые дислокации ($д$ — базальная плоскость (0001) кристаллической решетки, $е$ — призматическая плоскость ($10\bar{1}0$), $ж$ — пирамидальная плоскость ($10\bar{1}1$), $з$ — пирамидальная плоскость ($10\bar{1}2$)); сплошные линии — смещения вдоль векторов Бюргера как функции расстояния от линии дислокации, штриховые — распределения плотности дислокации

Таблица 2

Полуширина ζ , энергия Пайерлса W_P , напряжение Пайерлса σ_{P-N} и энергия ядра $W_{a'/2}$, вычисленные с использованием модели Пайерлса — Набарро для винтовой и краевой дислокаций в плоскостях (0001), (10 $\bar{1}$ 0), (10 $\bar{1}$ 1) и (10 $\bar{1}$ 2) для магния

Плоскость	ζ , Å		W_P , мэВ/Å		σ_{P-N} , МПа		$W_{a'/2}$, мэВ/Å	
	ВД	КД	ВД	КД	ВД	КД	ВД	КД
(0001)	3,93	5,39	2,40	0,72	119,29	36,09	93,63	134,28
(10 $\bar{1}$ 0)	5,04	7,28	0,65	0,20	105,29	13,71	95,36	140,87
(10 $\bar{1}$ 1)	3,35	4,73	7,27	2,29	422,43	116,52	91,64	136,35
(10 $\bar{1}$ 2)	3,50	4,95	16,65	8,24	834,80	403,07	87,10	131,01

Примечание. ВД — винтовая дислокация, КД — краевая дислокация.

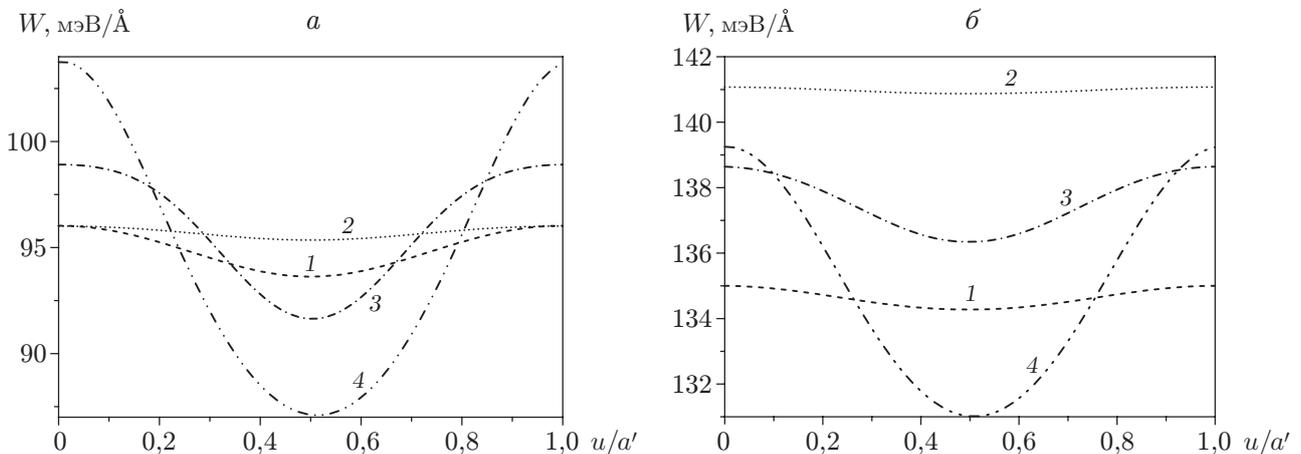


Рис. 5. Энергия дефектов $W(u)$ для винтовых (а) и краевых (б) полных a -дислокаций в различных системах скольжения: 1 — (0001), 2 — (10 $\bar{1}$ 0), 3 — (10 $\bar{1}$ 1), 4 — (10 $\bar{1}$ 2)

2.3. Энергия несовпадения, энергия и напряжение Пайерлса. На рис. 5 приведены результаты расчета значений энергии $W(u)$. Видно, что для всех четырех систем энергия дефекта $W(u)$ для винтовой дислокации всегда меньше, чем для краевой дислокации, тогда как изменение амплитуды винтовой дислокации больше, чем краевой. Это свидетельствует о том, что винтовая дислокация должна обладать большей энергией Пайерлса. Напряжения, полученные на границе раздела, показаны на рис. 6. Видно, что для одной и той же системы скольжения винтовые дислокации имеют большие максимальные напряжения по сравнению с краевыми дислокациями, поэтому винтовые дислокации имеют большие напряжения Пайерлса. Получены значения энергии W_P и напряжения σ_{P-N} Пайерлса для всех четырех систем скольжения (см. табл. 2). Следует отметить, что для одной и той же системы скольжения энергия Пайерлса для краевых дислокаций приблизительно в 2–3 раза меньше, чем для винтовых дислокаций. Это может указывать на то, что для продвижения краевых дислокаций требуется меньшее количество энергии.

Кроме того, установлено, что как для краевых, так и для винтовых дислокаций напряжения Пайерлса для четырех плоскостей скольжения (10 $\bar{1}$ 0), (0001), (10 $\bar{1}$ 1), (10 $\bar{1}$ 2) также возрастают. Призматическая плоскость (10 $\bar{1}$ 0) имеет наименьшую энергию Пайерлса: для винтовой дислокации — 105,29 МПа, для краевой — 13,72 МПа. Следовательно, в призма-

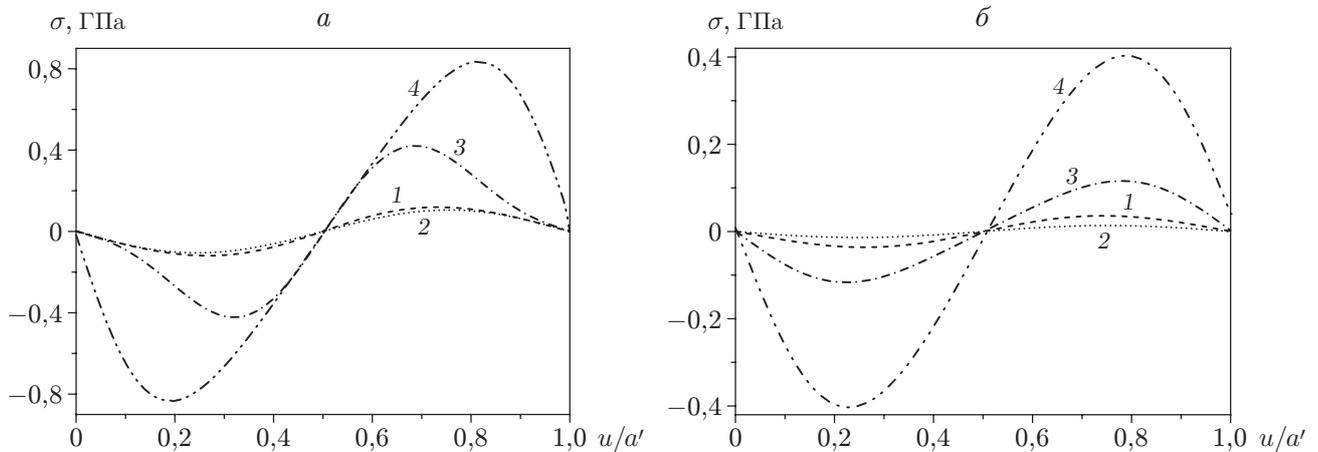


Рис. 6. Напряжения σ на поверхности раздела для винтовых (*а*) и краевых (*б*) полных a -дислокаций в различных системах скольжения (обозначения те же, что на рис. 5)

тической плоскости полным a -дислокациям продвигаться легче, чем в других плоскостях. Так как дислокации на базальной плоскости в магнии легко диссоциируют, это приводит к существенному уменьшению полной энергии дислокаций. Таким образом, дислокациям проще сформироваться на базальной плоскости, поэтому высока вероятность проскальзывания полных a -дислокаций из базальной плоскости в призматическую, что согласуется с экспериментальными данными [40, 41]. Перемещение дислокаций на пирамидальных плоскостях $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$ затруднено, что обусловлено большими напряжениями Пайерлса.

Вычислены энергии ядра дислокаций для всех четырех систем скольжения (см. табл. 2). Установлено, что на плоскости $(10\bar{1}0)$ энергия ядра краевой дислокации больше, чем на плоскости (0001) . Это значит, что для формирования дислокаций в плоскости $(10\bar{1}0)$ требуется большая неупругая энергия. Кроме того, дислокации в пирамидальных плоскостях $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$ обладают меньшими энергиями ядра, чем в базальной плоскости (0001) и призматической плоскости $(10\bar{1}0)$. Следовательно, дислокации в пирамидальных плоскостях $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$ имеют меньшую неупругую составляющую.

Заключение. В работе исследованы свойства ядер краевой и винтовой полных a -дислокаций для четырех систем скольжения на базальной плоскости (0001) , призматической плоскости $(10\bar{1}0)$ и пирамидальных плоскостях $(10\bar{1}1)$, $(10\bar{1}2)$ с использованием модели Пайерлса — Набарро с обобщенными энергиями повреждения укладки и вычислений на основе первичных принципов. Результаты показывают, что системы скольжения $(10\bar{1}1)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ и $(10\bar{1}2)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ имеют практически одни и те же энергетические барьеры ОЭД, которые, очевидно, больше энергетических барьеров ОЭД систем скольжения $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ и $(10\bar{1}0)\langle 11\bar{2}0 \rangle$. И для краевых, и для винтовых полных дислокаций максимум плотности дислокаций, энергии и напряжения дислокаций Пайерлса на плоскостях $(10\bar{1}0)$, (0001) , $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$ увеличивается. Следовательно, движение полных дислокаций в плоскостях $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$ существенно затруднено, в то время как перемещение дислокаций на плоскости $(10\bar{1}0)$ происходит относительно легко. Кроме того, значения энергии Пайерлса и напряжения Пайерлса винтовых полных дислокаций всегда меньше соответствующих значений для полных краевых дислокаций для всех систем скольжения, на пирамидальных плоскостях $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}2)$ дислокации обладают меньшими энергиями ядра.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Pollock T. M.** Weight loss with magnesium alloys // *Science*. 2010. V. 328. P. 986–987.
2. **Fedorov M. I., Zaitsev V. K., Isachenko G. N.** High effective thermoelectrics based on the Mg₂Si–Mg₂Sn solid solution // *Solid State Phenomena*. 2011. V. 170. P. 286–292.
3. **Agnew S. R., Duygulu O.** Plastic anisotropy and the role of non-basal slip in magnesium alloy AZ31B // *Intern. J. Plasticity*. 2005. V. 21. P. 1161–1193.
4. **Yasi J. A., Nogaret T., Trinkle D. R., et al.** Basal and prism dislocation cores in magnesium: comparison of first-principles and embedded-atom-potential methods predictions // *Modell. Simul. Mater. Sci. Engng.* 2009. V. 17. 055012.
5. **Yasi J. A., Hector L. G. (Jr.), Trinkle D. R.** Prediction of thermal cross-slip stress in magnesium alloys from direct first-principles data // *Acta Mater.* 2011. V. 59. P. 5652–5660.
6. **Sandlobes S., Friak M., Zaefferer S., et al.** The relation between ductility and stacking fault energies in Mg and Mg–Y alloys // *Acta Mater.* 2012. V. 60. P. 3011–3021.
7. **Hirth J. P.** *Theory of dislocations* / J. P. Hirth, J. Lothe. N. Y.: Wiley, 1982.
8. **Wang R., Wang S. F., Wu X. Z., Wei Q. Y.** First-principles determination of dislocation properties in magnesium based on the improved Peierls — Nabarro equation // *Phys. Scripta*. 2010. V. 81. 065601.
9. **Teutonico L. J.** Dislocations in hexagonal crystals // *Mater. Sci. Engng.* 1970. V. 6. P. 27–47.
10. **Foreman A. J. E.** Dislocation energies in anisotropic crystals // *Acta Metall.* 1955. V. 3. P. 322–330.
11. **Gan Y. X., Jang B. Z.** A parametric derivation method for solving the Peierls — Nabarro dislocation equation with a non-sinusoidal law of interatomic forces // *J. Mater. Sci. Lett.* 1996. V. 15. P. 2044–2047.
12. **Vitek V.** Intrinsic stacking faults in body-centred cubic crystals // *Philos. Mag.* 1968. V. 18. P. 773–786.
13. **Schoeck G.** The Peierls model: Progress and limitations // *Mater. Sci. Engng. A*. 2005. V. 400. P. 7–17.
14. **Bulatov V. V., Kaxiras E.** Semidiscrete variational Peierls framework for dislocation core properties // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V. 78. P. 4221–4224.
15. **Joos B., Ren Q., Duesbery M.** Peierls — Nabarro model of dislocations in silicon with generalized stacking-fault restoring forces // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 50. P. 5890–5898.
16. **Hartford J., Sydow B. von, Wahnstrom G., Lundqvist B. I.** Peierls barriers and stresses for edge dislocations in Pd and Al calculated from first principles // *Phys. Rev. B*. 1998. V. 58. P. 2487–2496.
17. **Mryasov O. N., Gornostyrev Y. N., Parlor V. A.** Generalized stacking-fault energetics and dislocation properties: Compact versus spread unit-dislocation structures in TiAl and CuAu // *Phys. Rev. B*. 1998. V. 58. P. 11927–11932.
18. **Carrez P., Cordier P., Mainprice D., Tommasi A.** Slip systems and plastic shear anisotropy in Mg₂SiO₄ ringwoodite: insights from numerical modelling // *Eur. J. Mineral.* 2006. V. 18. P. 149.
19. **Carrez P., Ferre D., Cordier P.** Implications for plastic flow in the deep mantle from modelling dislocations in MgSiO₃ minerals // *Nature*. 2007. V. 446. P. 68–70.
20. **Ferre D., Carrez P., Cordier P.** Modeling dislocation cores in SrTiO₃ using the Peierls — Nabarro model // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 77. 014106.
21. **Metsue A., Carrez P., Denoual C., et al.** Plastic deformation of wadsleyite: IV dislocation core modelling based on the Peierls — Nabarro — Galerkin model // *Acta Mater.* 2010. V. 58. P. 1467–1478.

22. **Peierls R.** The size of a dislocation // Proc. Phys. Soc. London. 1940. V. 52. P. 34–37.
23. **Nabarro F. R. N.** Dislocations in a simple cubic lattice // Proc. Phys. Soc. London. 1947. V. 59. P. 256–272.
24. **Lu G., Kioussis N., Bulatov V. V., Kaxiras E.** Generalized-stacking-fault energy surface and dislocation properties of aluminum // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 3099–3108.
25. **Savin M. M., Chernov V. M., Stroková A. M.** Energy factor of dislocations in hexagonal crystals // Phys. Status Solidi (a). 1976. V. 35. P. 747–754.
26. **Yan J. A., Wang C. Y., Wang S. Y.** Generalized-stacking-fault energy and dislocation properties in bcc Fe: A first-principles study // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. 174105.
27. **Joos B., Duesbery M.** The Peierls stress of dislocations: An analytic formula // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 266–269.
28. **Ren Q., Joos B., Duesbery M.** Test of the Peierls — Nabarro model for dislocations in silicon // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. 13223.
29. **Li J., Wang C. Z., Chang J. P., et al.** Core energy and Peierls stress of a screw dislocation in bcc molybdenum: A periodic-cell tight-binding study // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. 104113.
30. **Kresse G., Furthmüller J.** Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169–11186.
31. **Bloch P. E.** Projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 17953–17979.
32. **Perdew J. P., Wang Y.** Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. 13244.
33. **Monkhorst H. J., Pack J. D.** Special points for Brillouin-zone integrations // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 5188–5192.
34. **Wachowicz E., Kiejna A.** Bulk and surface properties of hexagonal-close-packed Be and Mg // J. Phys. Condens. Matter. 2001. V. 13. 10767.
35. **Yasi J. A., Hector L. G. (Jr.), Trinkle D. R.** First-principles data for solid-solution strengthening of magnesium: From geometry and chemistry to properties // Acta Mater. 2010. V. 58. P. 5704–5713.
36. **Singh D., Varshni Y.** Debye temperatures for hexagonal crystals // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. P. 4340–4347.
37. **Yasi J. A., Hector L. G., Trinkle D. R.** Prediction of thermal cross-slip stress in magnesium alloys from a geometric interaction model // Acta Mater. 2012. V. 60. P. 2350–2358.
38. **Wu X. Z., Wang R., Wang S. F.** Generalized-stacking-fault energy and surface properties for HCP metals: A first-principles study // Appl. Surf. Sci. 2010. V. 256. P. 3409–3412.
39. **Wang H. Y., Zhang N., Wang C., Jiang Q. C.** First-principles study of the generalized-stacking-fault energy in Mg–3Al–3Sn alloy // Scripta Mater. 2011. V. 65. P. 723–726.
40. **Couret A., Caillard D.** An in situ study of prismatic glide in magnesium. 1. The rate controlling mechanism // Acta Metall. 1985. V. 33. P. 1447–1454.
41. **Couret A., Caillard D.** An in situ study of prismatic glide in magnesium. 2. Microscopic activation parameters // Acta Metall. 1985. V. 33. P. 1455–1462.

Поступила в редакцию 19/XI 2012 г.
