

УДК 539.37

## ДИСЛОКАЦИОННАЯ ДИНАМИКА КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОГО СКОЛЬЖЕНИЯ

Л.Е. Попов, С.Н. Колупаева, Н.А. Вихорь, С.И. Пуспешева (Томск)

### Abstract

*Plastic deformation in crystals occurs by elementary crystallographic shears in local regions. The propagation of a elementary crystallographic shear is the expansion of the dislocation loop, which appears as a result of stability loss of a dislocation segment. This segment acts as a dislocation source and emits a series of the dislocation loops that form a crystallographic slip zone. The dislocation dynamics of the crystallographic slip zone formation is studied in the assumption that dislocation line tension is constant and the closed dislocation loop keeps the form of circle. The differential equations for the  $i$ -th dislocation loop expansion are considered.*

Описание эволюции элементарного скольжения есть описание динамического поведения расширяющихся элементарных планарных дислокаций (дислокационных петель). Фронт элементарного скольжения (граница, отделяющая область, где кристаллографический сдвиг произошел, от области, где сдвиг еще отсутствует) есть, по определению, дислокация. Динамика кристаллографического скольжения - это динамика связанных с ним замкнутых планарных дислокационных конфигураций. Распространение скольжения есть расширение составляющей его границу замкнутой планарной дислокации; сжатие скольжения есть сокращение этой дислокации, инволюция замкнутой дислокации; пульсация элементарного скольжения есть осцилляция дислокации около конфигурации ее равновесия, определяемой балансом сил Пича-Келера, сил линейного натяжения и сил отталкивания от дислокаций, накопленных у непрозрачного для кристаллографического скольжения барьера.

При рассмотрении динамики и кинетики сдвиговой пластической деформации описание элементарного кристаллографического скольжения имеет фундаментальное значение. Этот структурный уровень - элементарное скольжение - с полным основанием можно назвать молекулой пластичности кристаллографического сдвига. Именно на уровне элементарных скольжений существует кристаллогеометрическое соотношение Инденбома-Орлова, отражающее неразрывное единство процессов скольжения и производства дислокаций. Именно элементарные скольжения порождают точечные деформационные дефекты, и области, где произошло скольжение, в кинетической теории пластичности могут рассматриваться, как планарные (двумерные) источники точечных дефектов. При этом имеют место кристаллографические соотношения, связывающие количество деформационных дефектов, производимых при скольжении, с вкладом, который это скольжение вносит в сдвиговую деформацию кристалла [1,2]. Кроме того, области кристаллографического скольжения являются источниками тепла при описании тепловых потоков, сопутствующих пластической деформации скольжения.

Чтобы получить кинематические и динамические характеристики распространения элементарного скольжения, можно идти по пути имитационного моделирования связанной со скольжением замкнутой планарной петли [3]. Приближая спектр препятствий, их «прочность», характер распределения в плоскости скольжения точек их взаимодействия со скользящей дислокацией, можно получать все более близкую к реальной картину эволюции конфигурации элементарных скольжений.

Однако ввиду множественности и стохастичности взаимодействий и исключительной сложности возникающих дислокационных конфигураций при имитационном моделировании не всегда удастся проследить глобальное поведение элементарного скольжения и определить его динамические характеристики. Поэтому для предварительного описания динамики кристаллографического скольжения представляется целесообразным предельно упростить ситуацию, заменив поле дискретных стопоров дислокационной природы однородной и изотропной средой, оказывающей такое же сопротивление движению дислокации, что и исходное поле. Тогда в приближении линейного натяжения замкнутая дислокация в форме окружности, связанная с элементарным скольжением, расширяясь, будет сохранять форму окружности. Рассмотрим в таком приближении (линейное натяжение постоянно, замкнутая дислокация, осуществляющая скольжение, после замыкания источника имеет форму окружности) дислокационную динамику кристаллографического скольжения, связанного с активностью дислокационного источника Франка-Рида.

В кристалле, в котором некоторое деформирующее воздействие создает напряжение сдвига  $\tau$ , на дислокации действуют силы Пича-Келера, величина которых на единицу длины сегмента-источника равна по модулю  $|\vec{f}| = \tau b$ , где  $b$ -модуль вектора Бюргерса. Под действием этой силы дислокационный сегмент, имеющий конфигурацию источника Франка-Рида, смещается, выгибаясь, между точками закрепления. При возрастании напряжения происходит дальнейшее выгибание дислокационного сегмента, радиус его кривизны уменьшается. При некотором уровне напряжения  $\tau_c$  выгибающийся дислокационный сегмент достигает критической конфигурации (в приближении постоянного линейного натяжения и среды, оказывающей скользящей дислокации однородное и изотропное сопротивление, критической конфигурацией является полуокружность). Дальнейшее увеличение напряжения приводит к потере устойчивости сегмента, уменьшение радиуса его кривизны в докритических конфигурациях сменяется после прохождения критической конфигурации его увеличением. В процессе расширения области кристаллографического скольжения происходит замыкание дислокации позади источника и образуется замкнутая планарная дислокация.

Рассмотрим расширение замкнутой дислокации при распространении элементарного кристаллографического скольжения. На дислокацию действуют силы Пича-Келера, обусловленные внешним напряжением, силы линейного натяжения дислокации, силы решеточного и примесного трения и силы вязкого торможения. Предполагается, что сдвиг распространяется строго по одной кристаллографической плоскости, сохраняя при расширении форму окружности с текущим радиусом  $r$ .

Запишем суммарную силу  $F$ , которая действует на расширяющуюся замкнутую дислокацию. При внешнем напряжении  $\tau$  на единицу длины дислокации действует сила, равная по модулю  $\tau b$ . Движению петли препятствуют: 1) сила  $\tau_R b = (\tau_f + \tau_d) b$ , где  $\tau_f$  - напряжение решеточного и примесного трения,  $\tau_d = \alpha G b \rho^{1/2}$  - дислокационное сопротивление распространению кристаллографического скольжения ( $\alpha$  - параметр, характеризующий интенсивность междислокационных взаимодействий,  $G$  - модуль сдвига,  $\rho$  - плотность дислокаций); 2) сила  $\tau_\mu$ , обусловленная линейным натяжением  $\mu$ ,  $\tau_\mu = -\mu/r$ ; 3) сила вязкого торможения, обусловленная взаимодействием скользящей дислокации с фононной и электронной подсистемами, которую будем считать пропорциональной скорости движения дислокации  $v$  [4]  $f_v = Bv$ , где  $B$  - коэффициент вязкого торможения дислокаций. Таким образом, сила, действующая на расширяющуюся замкнутую дислокацию радиусом  $r$ , выражается

$$F = 2\pi r \left( \tau b - \tau_R b - \frac{\mu}{r} - Bv \right). \quad (1)$$

Дислокационная петля, испущенная источником, может на малом расстоянии ускоряться до высоких скоростей, иногда соизмеримых со скоростью звука в кристалле,  $c_t = \sqrt{G/d}$  ( $d$  - плотность материала), поэтому необходимо учитывать псевдорелятивистские эффекты [5]. Для энергии движущейся дислокации воспользуемся соотношением  $\varepsilon = \varepsilon_0 / \sqrt{1 - v^2/c_t^2}$ , где  $\varepsilon_0$  - энергия единицы длины покоящейся дислокации. Кинетическая энергия единицы длины дислокации, скользящей со скоростью  $v$ ,  $\varepsilon_k = \varepsilon_0 \left( 1 / \sqrt{1 - v^2/c_t^2} - 1 \right)$ .

Полная кинетическая энергия расширяющейся замкнутой дислокации радиусом  $r$  выражается формулой

$$\varepsilon_k^{(l)} = 2\pi r \varepsilon_k. \quad (2)$$

При увеличении радиуса петли на величину  $dr$  изменение ее кинетической энергии равно работе силы  $F$  при расширении петли на  $dr$ :

$$d\varepsilon_k^{(l)} = F dr. \quad (3)$$

Из (1)-(3) следует:

$$\frac{d\varepsilon_k}{dr} = (\tau - \tau_R) b - \frac{\mu}{r} - Bv. \quad (4)$$

Величина деформирующего напряжения  $\tau$ , при котором формируется кристаллографическое скольжение, определяется напряжением прохождения критической конфигурации  $\tau_c$ . То есть все дальнейшее выгибание сегмента-источника, его развитие в замкнутую конфигурацию и расширение замкнутой дислокации происходит под действием напряжения, равного критическому напряжению потери устойчивости сегментом-источником. Напряжение  $\tau_c$  может быть представлено как сумма сопротивления  $\tau_R$  движению прямолинейной дислокации и сопротивления, обусловленного силами натяжения сегмента выгнутого в критическую конфигурацию,  $\tau_c = \tau_R + \tau_\mu^{(c)}$ , где  $\tau_\mu^{(c)} = \mu_0 / (r_c b)$ ,  $r_c$  - радиус сегмента в критической конфигурации,  $\mu_0$  - линейное натяжение покоящейся дислокации.

Напряжение  $\tau = \tau_c$  при закритических конфигурациях дислокации, испускаемой источником, выше, чем сопротивление движению дислокации. Поэтому все посткритическое развитие замкнутой планарной дислокации происходит в динамическом режиме: дислокация движется с ускорением, работа равнодействующей всех сил за вычетом диссипируемой энергии запасается в форме кинетической энергии движущейся дислокации.

Подстановка  $\tau = \tau_c$  в уравнение (4) приводит его к виду

$$\frac{d\varepsilon_k}{dr} = \frac{\mu_0}{r_c} - \frac{\mu}{r} - Bv. \quad (5)$$

В (5)  $\mu = \mu_0 / \sqrt{1 - v^2/c_t^2}$ , поэтому уравнение динамики замкнутой дислокации, связанной с распространяющимся элементарным кристаллографическим скольжением, можно записать также в виде

$$\frac{d\varepsilon_k}{dr} = \mu_0 \left( \frac{1}{r_c} - \frac{1}{r \sqrt{1 - v^2/c_t^2}} \right) - Bv. \quad (6)$$

Исключим из уравнения (6) скорость движения дислокации, выразив ее через

кинетическую энергию дислокации,  $v = (\varepsilon_k / \varepsilon_0 + 1)^{-1}$ :

$$\frac{d\varepsilon_k}{dr} = \mu_0 \left[ \frac{1}{r_c} - \frac{1}{r} \left( \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0} + 1 \right) \right] - Bc_t \sqrt{1 - \left( \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0} + 1 \right)^{-2}}. \quad (7)$$

Принимая  $\mu_0 = \varepsilon_0$ , получим

$$\frac{d\varepsilon_k}{dr} = \varepsilon_0 \left( \frac{1}{r_c} - \frac{1}{r} \right) - \frac{\varepsilon_k}{r} - Bc_t \sqrt{1 - \left( \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0} + 1 \right)^{-2}}. \quad (8)$$

Уравнение (8) есть уравнение динамики первой замкнутой дислокации, испущенной источником. Однако после испускания первой замкнутой дислокации активность источника не прекращается. Дислокационный сегмент-источник после активации испускает серию замкнутых дислокаций, и все дислокации, начиная со второй, движутся в поле обратных напряжений, возрастающих с увеличением числа дислокаций, произведенных и накопленных у непрозрачных для кристаллографического скольжения барьеров. Напряжение  $\tau_i^{(i)}$  обратного поля, действующее на  $i$ -ю расширяющуюся замкнутую дислокацию, будем считать равным соответствующему напряжению для  $i$ -й дислокации скопления прямолинейных дислокаций [6]. Поскольку в замкнутой дислокации в форме окружности все ориентации дислокационной оси представлены одинаково, обратное напряжение  $\tau_i^{(k)}$  оценим как среднее арифметическое соответствующих напряжений от скопления  $(k-1)$  дислокаций краевой и винтовой ориентации:

$$\tau_i^{(i)} = \frac{Gb(i-1)}{2\pi} \frac{2-v}{2(1-v)} \frac{1}{(D/2)-r}. \quad (9)$$

Уравнение (8) динамики замкнутой расширяющейся дислокации для второй и последующих дислокаций, испущенных источником, имеет вид

$$\frac{d\varepsilon_k^{(i)}}{dr} = \varepsilon_0 \left( \frac{1}{r_c} - \frac{1}{r} \right) - \frac{Gb^2(i-1)}{2\pi} \frac{2-v}{2(1-v)} \frac{1}{(D/2)-r} - \frac{\varepsilon_k^{(i)}}{r} - Bc_t \sqrt{1 - \left( \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0} + 1 \right)^{-2}}. \quad (10)$$

Напряжение, необходимое для начала работы источника, вследствие несовершенства дислокационного источника, может превышать величину напряжения, при котором может осуществляться дальнейшее испускание дислокационных петель [1,2]. Кроме того, вторая и последующие дислокации при прохождении критической конфигурации обладают кинетической энергией, что приводит к тому, что источник испускает некоторое количество петель "по инерции". По этим причинам дислокационный источник после его активации испускает не одну дислокационную петлю, а серию петель.

Пусть источник характеризуется избыточным напряжением старта  $\Delta\tau_{st}$ , тогда он произведет  $n$  петель, число которых можно оценить из соотношения  $\Delta\tau_{st} = \tau^{(i)}(n)$  [1,2]. При  $\Delta\tau_{st} = 0.5Gb\rho^{1/2}$  количество испущенных дислокационным источником дислокационных петель  $n=314$  [1,2]. Таким образом, такой дислокационный источник произведет 314 дислокаций, после чего в результате действия обратных полей напряжений этих дислокаций он прекратит генерацию дислокаций, и формирование зоны будет завершено. Дислокации, движущиеся вследствие неустойчивости в динамическом режиме, приобретают значительную кинетическую энергию, во много раз превосходящую собственную энергию дислокации [5]. При расширении дислокационная петля приближается к дислокационной конфигурации, способной быть непреодолимым барьером. Кинетическая энергия дислокации при некотором значении

радиуса  $R$  расширяющейся петли падает до нуля, мгновенная скорость дислокации при этом также равна нулю. Поскольку расстояние  $R$  превышает равновесный радиус петли, при котором силы Пича-Келера, обусловленные приложенным напряжением, уравниваются силами отталкивания, создаваемыми полями напряжения прибарьерных дислокационных конфигураций, а также силами линейного натяжения рассматриваемой дислокационной петли, дислокационная петля после достижения радиуса  $R$  совершает обратное движение. При этом кинетическая энергия дислокации (и ее эффективная масса) возрастает, и дислокация в процессе ее обратного движения снова минует равновесный радиус и стягивается (сжимается) до радиуса меньшей величины. Таким образом, дислокационная петля пульсирует вблизи ее равновесного радиуса. Амплитуда "пульсаций" со временем уменьшается, поскольку кинетическая энергия дислокации расходуется на совершение работы против сил вязкого торможения.

Уравнение колебаний  $i$ -й дислокации получим, представив уравнение (10) с помощью соотношения  $dr = vdt$  в виде эквивалентной системы дифференциальных уравнений:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d\varepsilon_k^{(i)}}{dt} = \left( \pm \frac{\varepsilon_0 \mp \varepsilon_0 + \varepsilon_k^{(i)}}{r_c} \pm \frac{Gb^2(i-1)}{2\pi} \frac{2-v}{2(1-v)} \frac{1}{(D/2-r)} - Bc \sqrt{1 - \left( \frac{\varepsilon_k^{(i)}}{\varepsilon_0} + 1 \right)^{-2}} \right) c_l \sqrt{1 - \left( \frac{\varepsilon_k^{(i)}}{\varepsilon_0} + 1 \right)^{-2}}, \end{aligned} \right. \quad (11)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dr}{dt} = \pm c_l \sqrt{1 - \left( \frac{\varepsilon_k^{(i)}}{\varepsilon_0} + 1 \right)^{-2}}. \end{aligned} \right. \quad (12)$$

Здесь верхний знак соответствует движению дислокационной петли от источника, нижний - обратному движению.

На рис. 1-6 приведены результаты численного решения системы (11), (12) при значениях параметров, соответствующих меди и никелю, и различных плотностях дислокаций. Предполагалось, что барьер имеет форму окружности, диаметр которой определяется соотношением для среднего диаметра зоны кристаллографического скольжения [7]:  $D = \alpha B_r \rho^{-1/2}$ , где  $B_r$  - параметр.

Замкнутая дислокация, концентрическая с барьером, совершает затухающие колебания; период колебания уменьшается с увеличением номера колебания (см. рис. 1-6). С увеличением плотности дислокаций период колебаний уменьшается (см. рис. 3-4). При уменьшении плотности дислокаций увеличивается кинетическая энергия, но при этом дислокация совершает меньшее число колебаний до остановки в равновесном положении (см. рис. 3-4). На рис. 1-2 видно равновесное положение, около которого происходят колебания дислокации.

На рис. 5-6 приведена зависимость кинетической энергии и радиуса 100-й дислокационной петли от времени для никеля и меди. Из рисунка видно, что в никеле дислокации приобретают большую кинетическую энергию, чем в меди. Время колебания петли до достижения равновесного положения примерно одинаково.

Амплитудные значения кинетической энергии дислокации при первых колебаниях весьма высоки: для сотой дислокации они достигают  $10^{-7}$  Дж/м, это соответствует  $\varepsilon_k^{(100)} = 50\varepsilon_0$ . С увеличением плотности дислокаций в деформируемом кристалле амплитудные значения кинетической энергии уменьшаются, однако при всех плотностях дислокаций остаются высокими. Так, при  $\rho = 5 \cdot 10^{13} \text{ м}^{-2}$  амплитуда первого колебания 300-й дислокации  $\varepsilon_k^{(300)} \approx 5\varepsilon_0$  (см. рис. 5). Таким образом, при кристаллографическом скольжении дислокации осуществляют значительный энергоперенос.

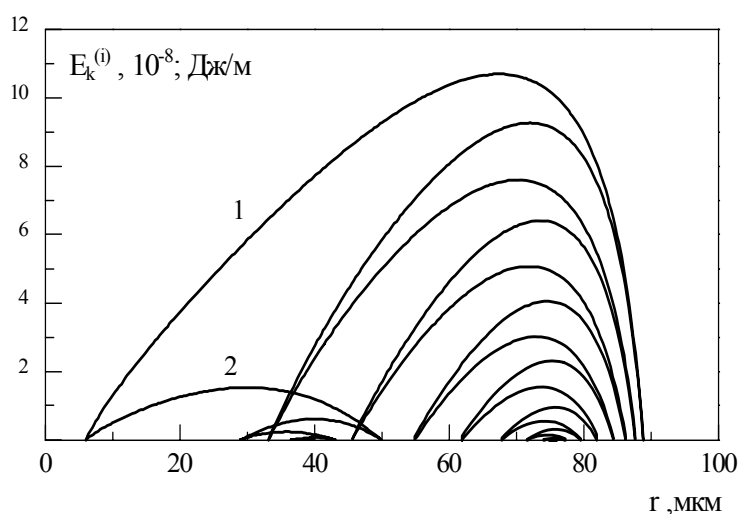


Рис. 1. Зависимость кинетической энергии расширяющейся дислокационной петли от радиуса: 1) -  $i = 100$ ; 2) -  $i = 314$

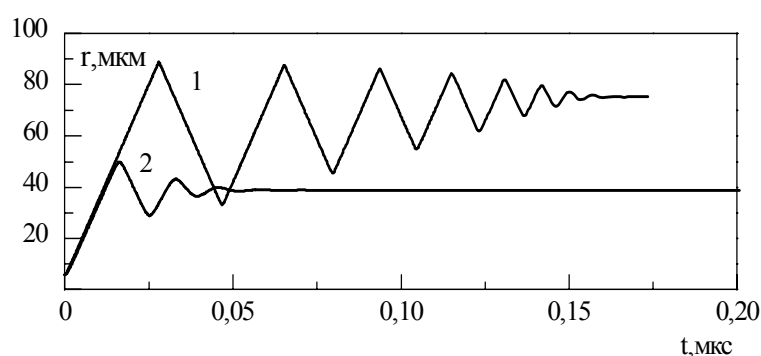


Рис.2. Зависимость радиуса дислокационной петли от времени  
1)-  $i = 100$ ; 2) -  $i = 314$

Описанная картина соответствует свободным колебаниям дислокации, когда контактные взаимодействия между дислокациями, произведенными источником, отсутствуют. В действительности такие взаимодействия происходят и существенно усложняют картину. Это, во-первых, «соударения» нескольких первых дислокаций с малыми  $i$  с приборьерными дислокациями. Во-вторых, столкновение дислокации в фазе ее обратного движения со следующей произведенной источником дислокацией. Кинетическая энергия дислокаций, как при «прямом», так и при обратном движении может многократно превосходить энергию взаимодействия дислокаций и их собственную энергию. Поэтому при кристаллографическом скольжении, связанном с действием одного источника, часто возникают сверхдислокации с векторами Бюргера, равными двум (в фазе обратного скольжения) и нескольким (в случае приборьерных столкновений) векторам Бюргера единичной дислокации.

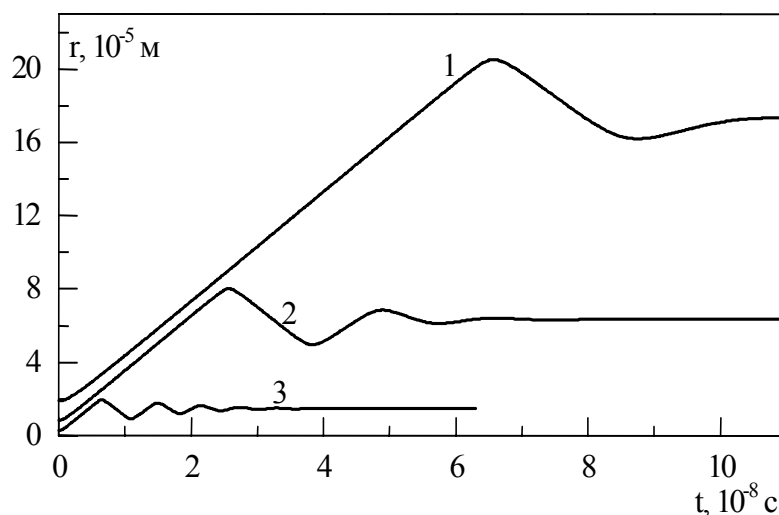


Рис.3. Зависимость радиуса 300-й дислокации от времени при различной плотности дислокаций  $\rho$  ( $\text{м}^{-2}$ ):  
1)  $10^{12}$ ; 2)  $5 \cdot 10^{12}$ ; 3)  $5 \cdot 10^{13}$ , никель.

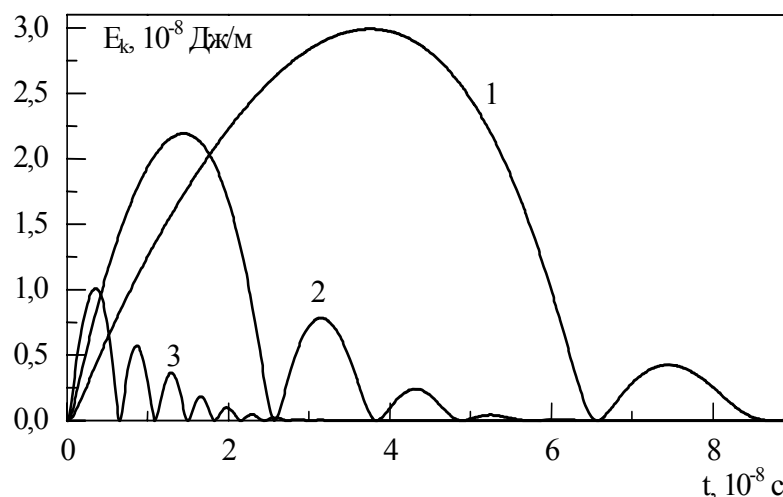


Рис. 4. Зависимость кинетической энергии 300-й дислокации от времени при различной плотности дислокаций  $\rho$  ( $\text{м}^{-2}$ ):  
1)  $10^{12}$ ; 2)  $5 \cdot 10^{12}$ ; 3)  $5 \cdot 10^{13}$ , никель.

Вязкое торможение и решеточное трение при слиянии дислокаций в сверхдислокацию резко возрастают, поэтому после небольшого пробега сверхдислокация распадается на единичные дислокации. Образование «динамических» сверхдислокаций в результате столкновений дислокаций, производимых источником, является, таким образом, одним из факторов, ограничивающих диаметр элементарного кристаллографического скольжения.

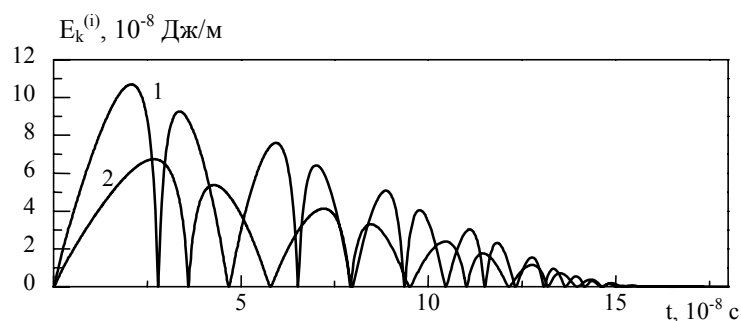


Рис. 5. Зависимость кинетической энергии 100-й дислокации от времени для никеля (1) и меди (2).

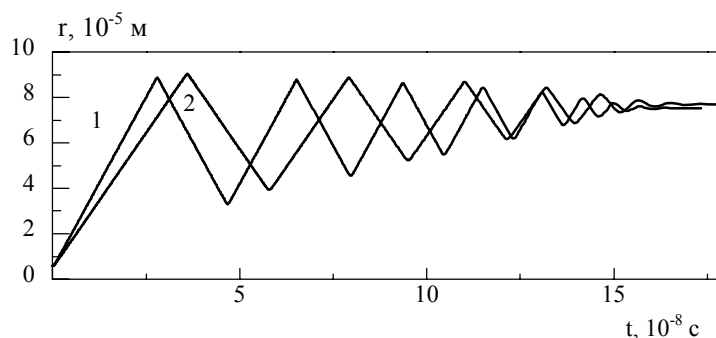


Рис.6. Зависимость радиуса 100-й дислокации от времени для никеля (1) и меди (2).

### Библиографический список

1. Попов Л.Е., Пудан Л.Я., Колупаева С.Н. и др. Математическое моделирование пластической деформации. - Томск: Изд-во Том. ун-та, 1990. - 185 с.
2. Колупаева С.Н., Старенченко В.А., Попов Л.Е. Неустойчивости пластической деформации кристаллов. - Томск: Изд-во Том. ун-та, 1994. - 301 с.
3. Слободской М.И., Попов Л.Е. Особенности работы источника Франка-Рида в поле случайно расположенных препятствий // Изв. АН. Серия физическая. - 1998. - Т. 62. - № 7. - С. 1338-1343.
4. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Динамическое торможение дислокаций //УФН. - 1975. Т. 115. № 1. - С. 3-39.
5. Колупаева С.Н., Вихорь Н.А., Коротчаева Н.В., Попов Л.Е. Движение дислокаций при формировании полосы кристаллографического скольжения //ФММ. - 1995. Т. 80. Вып. 4. - С. 51-57.
6. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. - М.: Атомиздат, 1972. - 600 с.
7. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. Пластическая деформация сплавов. - М.: Металлургия, 1984. - 183 с.

Получено 10.04.99.