

КЛАССИФИКАЦИЯ МЕХАНИЗМОВ ЗАМЫКАНИЯ И НЕЗАМЫКАНИЯ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО СЕКМЕНТА-ИСТОЧНИКА В ДИСЛОКАЦИОННУЮ ПЕТЛЮ

М.И.Слободской, Л.Е.Попов (Томск)

Abstract

By data processing of the compute-experiment imitating of elementary crystallographic slip propagation in a slip plane with the accidentally located discrete obstacles, sets, that the potential source only in 76 % of cases generates a dislocation loop on a site of a glide plane commensurable with the sizes of a slip zone. The mechanisms of closing and nonclosing of a potential source in a dislocation loop are classified and the frequencies of the relevant events (empirical and bootstrap-estimations) are reduced. The start (initial) configurations of a source at it repeated start are systematized

Введение

В науке о пластичности кристаллов сложились два естественных подхода. Первый - непосредственно от макроскопических пластических деформаций через понятие сплошной деформируемой среды. Деформация в сплошной среде - объект исследования преимущественно механики пластичности. Другой путь, в каких-то отношениях противоположный первому, - из глубин атомного строения кристаллических тел и межатомных связей, обеспечивающих существование кристаллического состояния, к макроскопическому описанию пластического формоизменения кристаллов. Этот путь познания преобладает в физике пластичности. Оба подхода долго развивались относительно независимо, однако в последние десятилетия наметилось активное стремление к их взаимному проникновению и, в перспективе, к синтезу в единый процесс познания явления пластичности кристаллов. Об этом говорит появление таких разделов механики, как структурно-аналитическая механика [1] и физическая мезомеханика [2]. Важным достижением физики и механики пластичности кристаллов было осознание того факта, что кристаллическое тело в условиях пластического формоизменения под деформирующим воздействием самоорганизуется в сложную иерархическую систему [3-5], и что описание пластического поведения кристаллов как целостного явления должно охватывать всю иерархию структурных и масштабных уровней. Такая концепция с неизбежностью требует адекватного описания процессов, происходящих на уровне элементарных микромеханизмов. Прежде всего, это относится к сдвиговой деформации, доминирующей в большинстве металлических материалов и сопутствующей другим механизмам пластичности там, где они являются преобладающими. В свою очередь, фундаментальным механизмом, лежащим в основе сдвиговой пластической деформации, является возникновение в определенных кристаллографических плоскостях элементарных кристаллографических скольжений на одно межатомное расстояние в направлении скольжения. Несмотря на обилие результатов в данном направлении, многое предстоит изучить, систематизировать, переосмыслить. Нуждается в переформулировке ряд уже решенных частных задач, так как они

рассмотрены на доминирующем в современной теории дислокаций уровне незамкнутых дислокаций. Это - прямолинейные бесконечные дислокации, конечные отрезки бесконечных прямолинейных дислокаций, подвижные звенья дислокационных сегментов, квазипрямолинейные дислокации [6]. Этот уровень естественно назвать субдислокационным, поскольку он имеет дело не со всей замкнутой дислокацией (дислокационной петлей, ограничивающей область кристаллографического сдвига) - минимальным объектом, отражающим свойства дислокационной подсистемы, а лишь с ее участками, что приводит к потере части информации о дислокационной подсистеме, неполноте рассмотрения, к модельным эффектам и проблемам.

При описании расширения дислокационной петли можно пойти двумя путями:

а) сделать следующий шаг по пути континуализации в описании механизмов пластической деформации: заменить суммарное сопротивление дискретных препятствий, какими являются дислокации леса, распределенными силами трения, которые обеспечивают такое же сопротивление. Так и поступают например при моделировании действия дислокационного источника [7], при описании движения участка дислокации или расширении дислокационной петли; б) имитировать распространение кристаллографического скольжения на ЭВМ. В силу ряда известных причин [8, 9] последний подход более перспективен и развивается в предложенной работе.

Модель

Принципиальные основы имитации движения прямолинейных бесконечных дислокаций по относительно небольшому полю случайно расположенных препятствий заложены в работе [10]. Усилиями многочисленных последователей сформировалась модель, известная как «барьерная модель постоянного линейного натяжения» [9]. Значительное число исследований посвящено освобождению от некоторых ее ограничений (см. библиографию в обзорах [8, 9, 11]). Однако моделируемая дислокация оставалась бесконечной «квазипрямолинейной».

В [12] описана модель и принципы ее алгоритмизации для имитации зарождения и распространения элементарного кристаллографического сдвига в плоскости, содержащей случайно расположенные препятствия с дискретным набором прочностей. По существу она является синтезом (не просто механическим слиянием) барьерной модели постоянного линейного натяжения и классической модели [13] работы дислокационного источника в вязком надбарьерном режиме [14]. При этом, наиболее существенная ревизия первой модели состоит в том, что снято ограничение квазипрямолинейности, чуждое природе дислокаций в кристалле. Во вторую модель введены дискретные препятствия. Основные преимущества такого подхода в том, что а) зарождение и распространение элементарного кристаллографического сдвига рассматриваются в единых предположениях; б) дислокационная подсистема представлена своим минимальным элементом - замкнутой планарной дислокационной петлей, развивающейся по законам дислокационной микромеханики в плоскости кристаллографического скольжения произвольных размеров с барьерами для дислокаций.

Входными параметрами модели являются координаты источника или точки закрепления дислокационной петли, относительные концентрации и прочности препятствий, условия деформирования, деформируемый кристалл. Выходные характеристики зависят от целей исследований.

Ниже приводятся результаты верификации модели применительно к монокристаллам меди, ориентированных для одиночного скольжения в плоскости $\langle 111 \rangle$ в направлении $[110]$ с плотностью дислокаций леса 10^8 см^{-2} . Препятствия интерпретируются как точки пересечения дислокаций некопланарных систем скольжения с плоскостью залегания источника. Они естественным образом делятся на сильные и слабые (реагирующий и нереагирующий лес) из-за существенного различия как в уровне напряжений, необходимых для их преодоления, так и в возможных механизмах преодоления [15, 16]. Если предположить, что: 1) дислокации некопланарных систем скольжения равномерно распределены по ориентациям; 2) распределение точек пересечения дислокаций леса с плоскостью кристаллографического скольжения пробной дислокации является случайным равномерным; 3) число препятствий на единицу площадки моделирования равно плотности дислокаций леса, то многочисленные результаты по прочностям дислокационных соединений [15-17] выражаются в терминах критических углов огибания препятствий [8]. Результаты [17] представлены в таблице, где c_i , φ_i - относительные концентрации и критические углы огибания стопоров i -го типа ($i=1,5$); стопоры 2,3,4,5 - атермические («сильные»).

Типы, концентрации и прочности препятствий

i	Тип реакции	c_i , [16]	φ_i , град.
1	—	0,833	163,5
2	$\overline{BA}, d + \overline{DB}, c = \overline{DA}, c$	0,056	95,7
3	$\overline{BA}, d + \overline{AC}, b = \overline{BC}, d$	0,027	127,2
4	$\overline{BA}, d + \overline{DB}, a = \overline{DA}$	0,065	65,8
5	$\overline{BA}, d + \overline{DC}, a = \overline{BD} / \overline{AC}$	0,019	113,4

Успешные термоактивационные попытки допускаются только на стопорах первого типа, так как дислокационное соединение разрушается силовым путем либо преодолевается ооровановским огибанием. Остальные значения параметров модели определяются константами кристалла и условиями машинных экспериментов. Организация активационного процесса описана в [18].

Под действием приложенного напряжения дислокационный отрезок, шарнирно закрепленный в двух точках, начинает прогибаться, образуя ряд последовательных конфигураций, каждая из которых однозначно определяется набором углов огибания [9] на «встреченных» препятствиях, набором длин дислокационных сегментов и приложенным напряжением (рис.1, фрагмент1). Если сегмент попадает в конфигурацию, которую он не может преодолеть с помощью термических флуктуаций или силовым путем при данном напряжении, то увеличивается приложенное напряжение. Минимальное напряжение τ , при котором генерируется дислокационная петля, принято за напряжение старта источника τ_{st} . Конфигурацию, стабильную при напряжении $\tau_{st} - \Delta\tau$ (здесь $\Delta\tau \approx +0$) и расширяющуюся в надбарьерном режиме до замыкания в дислокационную петлю при напряжении τ_{st} или до границы участка плоскости кристаллографического скольжения, будем называть конфигурацией потери устойчивости; дугу полуокружности, опирающейся на сегмент-источник как на диаметр, - критической конфигурацией. Рис.1 отражает типичные события,

наблюдаемые в машинных экспериментах: пройдя конфигурацию потери устойчивости (последняя на фрагменте 1) и ряд промежуточных конфигураций а, б, в, г (фрагмент 2), сегмент замыкается в дислокационную петлю (фрагмент 3), от которой отделяется "хвост" (tail) (фрагмент 4), фрагменты 3,4 - начальная конфигурация источника для его повторного старта. Эволюция дислокации за конфигурацией потери устойчивости при напряжении τ_{st} происходит в надбарьерном динамическом режиме, в том числе и сгенерированной источником дислокационной петли.

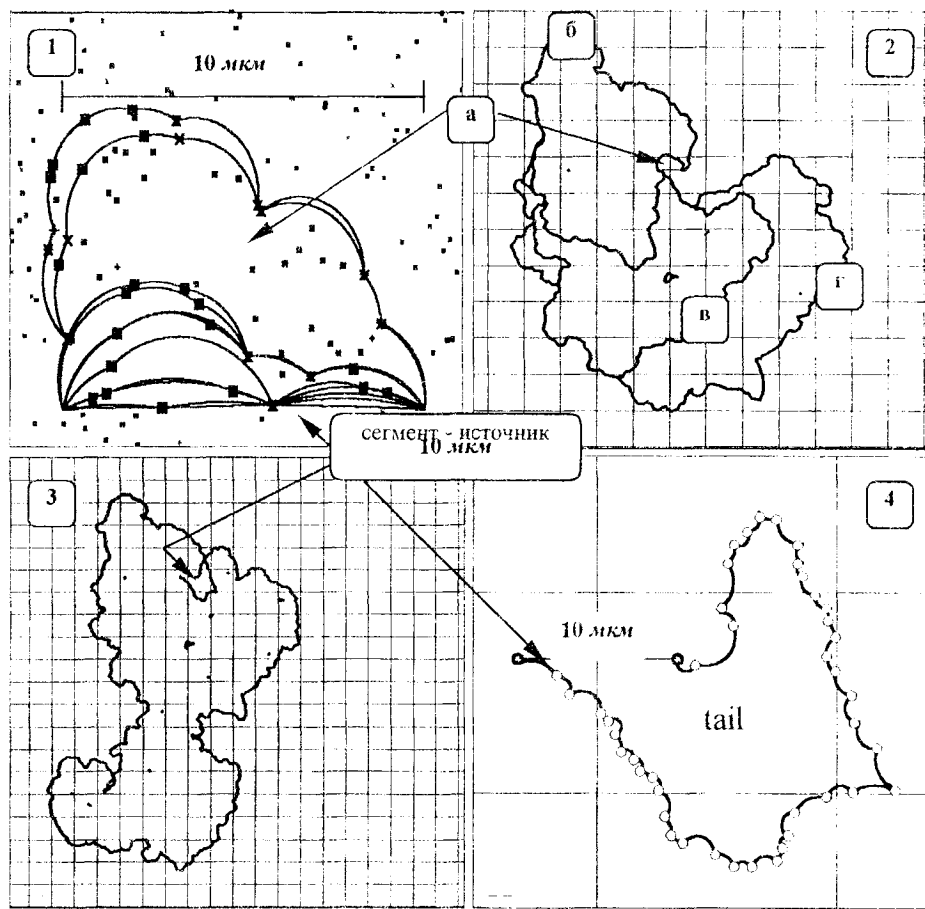


Рис. 1. Эмиссия дислокационной петли источником Франка-Рида, в плоскости залегания которого расположены случайно распределенные препятствия (результаты компьютерного эксперимента). Стрелкой указан потенциальный сегмент-источник; стопоры плоскости кристаллографического скольжения, за исключением первого фрагмента, не показаны - в каждом квадрате сетки рисунков в среднем по 225 стопоров

Основное внимание в предлагаемой работе сосредоточено на моменте замыкания (если таковое происходит) сегмента - источника в дислокационную петлю. Вопросы, связанные с напряжением старта источника дислокаций, обсуждены в [19], а

эволюция петли от источника под действием приложенного напряжения τ_{st} прослежена в [20].

Результаты моделирования

Рассматриваемые участки плоскости кристаллографического скольжения $0,36 \text{ мкм}^2$ содержали около 360 тысяч стопоров, что соответствует в среднем одному стопору на единицу безразмерной (в единицах $l_s^2 = \rho^{-1}$, где ρ - плотность дислокаций некомпланарных систем скольжения) площади. Это более чем в 2 раза превышает оценки [17] размеров зоны сдвига и сделано с целью более продолжительного наблюдения за изменениями дислокационных конфигураций. Даже в такой, завышенной по размерам площадке моделирования, отмечены случаи, когда за эволюцией сегмента удавалось проследить только на площади около $20000l_s^2$ (5,6% от площади всего участка моделирования), наблюдалась сильная анизотропия в продвижении сегментов, связанная со случайным расположением стопоров и существенной разницей в их прочностях.

Проведено 72 машинных эксперимента с вариацией длин потенциальных сегментов-источников: 2, 3, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 19 мкм - по 6 в каждой точке, за исключением первой, где было поставлено 12 экспериментов. Из них в 19 (26,4%) не наблюдалось эмиссии дислокационной петли и это относится не только к длинным потенциально возможным источникам - таковых чуть более половины (52%). Конечно же, на более протяженном участке плоскости кристаллографического скольжения сегмент рано или поздно замкнется в дислокационную петлю (в 4 специально поставленных экспериментах для генерации петли потребовалось в 2 раза большее поле). Так как параметры, определяющие размеры зоны сдвига, варьируются в довольно широких пределах [15], то необходима зависимость вероятности срабатывания потенциального источника дислокаций от размеров площадки моделирования (рис.2). Достаточно надежные традиционные оценки вероятностей соответствующими частотами в данном случае требуют значительного увеличения количества экспериментов и мы вынуждены были прибегнуть к бутстреп-оценкам [21] по 50000-кратно размноженной выборке. На рис. 2 для точки, помеченной единицей, 95% бутстреп-доверительный интервал составил [0,639; 0,833]. Остальные точки построены на центрах соответствующих интервалов.

Несмотря на общую причину незамыкания потенциального сегмента-источника в дислокационную петлю (ограниченная размерами зоны сдвига площадка моделирования), все их можно условно разбить на три группы примерно с одинаковым количественным составом: 1) с ярко выраженной анизотропией эволюции дислокационной конфигурации (31,6%). Происходит это тогда, когда конфигурация потери устойчивости отвечает высокое (по отношению к критическому напряжению преодоления сетки препятствий [17]) значение приложенного напряжения; 2) с дислокационной конфигурацией, близкой к замыканию, но все же с раньше выходящей на границу площадкой моделирования (31,6%); 3) с развитием конфигурации, происходящей равномерно по всем направлениям, и с сегментами, составляющими дислокацию, остающимися выше первоначального положения потенциального сегмента-источника (31,6%). Такая картина наблюдается при малых напряжениях. Подобная ситуация описана Н.А. Тяпуниной [14] при моделировании работы источника Франка-Рида в вязком надбарьерном режиме под действием ультразвука.

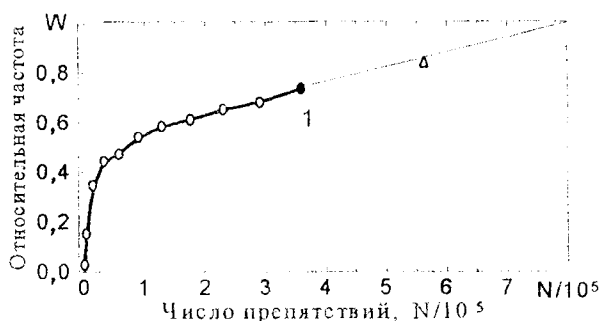


Рис. 2. Зависимость относительной частоты W стартовавших источников дислокаций от размеров участка плоскости кристаллографического скольжения. Δ - соответствует дополнительным экспериментам, тонкая линия - линейная экстраполяция по двум последним точкам графика на единичную частоту

Переходим далее к вопросу, как происходит замыкание сегмента-источника в дислокационную петлю. Согласно результатам проведенных экспериментов имеют место два типичных варианта. Мы называем их соответственно классическим и спиральным механизмами замыкания.

Классический механизм (см. рис.1, 3). Так его изображают во все публикациях, начиная с Фрайка и Рида [13], - при равномерном расширении дислокационного сегмента две смежные по отношению к точкам закрепления дуги пересекаются. Разница лишь в том, что точка замыкания изображается традиционно примерно под серединой источника (и это действительно так в поле препятствий малой прочности [17]), тогда как ее положение довольно произвольно: от традиционного (см. рис. 3, фрагмент 1), до значительного смещения вправо и влево под источником и даже над источником (см. рис. 3, фрагменты 3, 4, 2). Эта, казалось бы, незначительная поправка, может быть причиной того, что источник сравнительно редко наблюдают в электронном микроскопе.

Спиральный механизм. В этом случае часть дислокации, примыкающая к одной точке закрепления сегмента-источника, заблокирована сильными препятствиями и не движется, другая, расширяясь, "подходит" к этой точке закрепления. Крайне редко (всего в 4 экспериментах из 72) одна из точек закрепления вместе с близлежащими препятствиями огибается по механизму Орована, оставляя на них кольцо (см. рис.3, фрагменты 6, 10), что приводит к деформационному упрочнению источника. Такое редкое событие наступает при пересечении трех событий: короткие источники; окрестность одной из точек закрепления источника образует локальный сгусток [22] - событие не столь уж и редкое для действительно случайно расположенных точек на плоскости [22]; в сгустке повышена (по сравнению со средним значением) концентрация сильных препятствий.

Отмеченные механизмы замыкания практически равновероятны - 50,9% и 49,1%, соответственно. Статистические методы не обнаруживают для данного количества проведенных экспериментов значимых зависимостей между механизмом замыкания и длиной источника, механизмом замыкания и напряжением старта источника.

После эмиссии дислокационной петли источником, последняя расширяется в динамическом режиме и последний "готов" для генерации следующей петли. Но начальные условия его повторного старта значительно отличаются от исходных - теперь он обладает определенной кинетической энергией, зависящей от "предыстории" и, прежде всего, от своих геометрических характеристик. Этим обстоятельством обычно пренебрегают в традиционных расчетах величины локализации в зоне сдвига, учитывая лишь обратные напряжения, обусловленные уже испущенными дислокационными петлями.

Всё наблюдаемое в ЭВМ-экспериментах многообразие начальных (стартовых) конфигураций дислокационных источников при их повторном срабатывании (tail - конфигурации, "хвосты" от отделившейся петли) укладывается в три группы (три горизонтальных ряда фрагментов на рис.3):

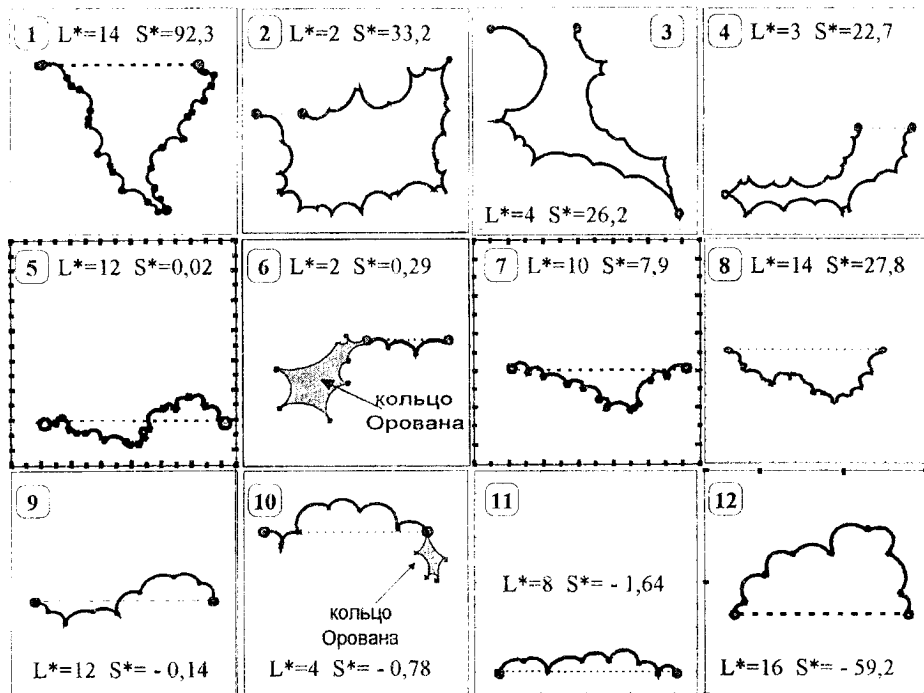


Рис. 3. Классификация начальных конфигураций дислокационных источников при их повторном старте. Числа в квадратиках - порядковые номера фрагментов рисунка, S^* - площади конфигураций в единицах средней площади $(l_s)^2$ на одно препятствие в плоскости кристаллографического скольжения, L^* - начальная длина сегмента-источника в единицах l_s

1) конфигурации, оставшиеся после замыкания сегмента-источника в дислокационную петлю по классическому механизму; 2) конфигурации, образующиеся по спиральному механизму и расположенные в среднем ниже точек закрепления источника. Этот факт отражается на рисунках положительной площадью S^* между соответствующей tail-конфигурацией и первоначальным положением сегмента-источника; 3) конфигурации, расположенные в среднем выше точек закрепления сегмента (с отрицательными S^*).

Последние два класса можно еще разбить на пары в зависимости от того, образуются или нет ооровановские кольца. Такая классификация, впрочем, как и любая другая, довольно условна. Но она отражает суть дела. Геометрические характеристики конфигураций первого типа статистически независимы от длины источника, тогда как для последних двух типов имеет место тенденция роста S^* с длиной источника.

Данная информация может быть использована для уточнения оценок [23] величины локализации сдвига в зоне.

Библиографический список

1. Лихачев В.А., Малинин В.Г. Структурно-аналитическая теория прочности. - СПб.: Наука, 1993. - 471 с.
2. Панин В.Е. современные проблемы прочности твердых тел // Изв. СО АН СССР. Сер. техн. наук. 1987. Вып. 3. С. 87 - 97.
3. Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Еясукова Т.Ф., Иванчин А.Г. Структурные уровни деформации твердых тел // Изв. вузов. Физика. 1982. № 6. С. 5 - 27.
4. Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука Сиб. отд-ние, 1985. 229 с.
5. Структурные уровни пластической деформации и разрушения/ В.Е. Панин, Ю.В. Гриняев, В.И. Данилов и др. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1990. 255 с.
6. Labusch R. Statistical theory of dislocation configurations in a random array of point obstacles // J.Appl. Phys. - 1977. - V.48. № 11. - P. 4550-4556.
7. Тяпунина Н.А., Благовещенский В.В., Зиненкова Г.М., Ивашкин Ю.А. Особенности пластической деформации под действием ультразвука // Изв. вузов. Физика. 1982. № 6. С. 118 - 128.
8. Предводителев А.А. Возможности моделирования процессов, связанных с движением и размножением дислокаций в кристаллах //Динамика дислокаций. Киев. Наукова думка, 1975. С. 178 - 190.
9. Зайцев С.И. Моделирование движения дислокаций через точечные препятствия // Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ. - Л.: Наука, 1980. - С. 178-191.
10. Foreman A., Makin M. Dislocation movement through random arrays of obstacles //Phil. Mag 1966. Vol.14. № 131. P. 911 - 924.
11. Kubin L.P. Dislocation patterns: experiment, theory and simulation. NATO ASI on "Stability of Materials", Corfu, July 1995. 37 p.
12. Слободской М.И., Матющенко А.В., Голосова Т.Н. Алгоритмизация имитации образования дислокационной петли источником и процесса ее эволюции в плоскости кристаллографического скольжения со случайно распределенными дискретными препятствиями // Математ. моделир. систем и проц. - 1995. №3. - С. 88-96.
13. Frank F.C., Read W.L., Jr. Multiplication processes for flow moving dislocations // Phys. Rew. - 1950. - Vol.79. №4. - P. 722-723.
14. Tyapunina N.A., Ivashkin Yu.A. Excess concentration of point defects in alkali crystals exposed to ultrasouse weves // Phys. Stat. Sol. (a). - 1983. - Vol.79. - P. 351-359.
15. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ганзя Л.В. Теория деформационного упрочнения сплавов. - Томск: Изд-во Том. ун-та, 1981. - 176 с.
16. Куринная Р.И., Ганзя Л.В., Попов Л.Е. Сопротивление расширению дислокационной петли в ПЦК металлах // Изв. Вузов. Физика. - 1982. №8. - С. 35-38.

17. Кобытев В.С., Слободской М.И., Руссиян А.А. Моделирование на ЭВМ процессов взаимодействия и скольжения дислокаций. - Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1992. - 180 с.
18. Голосова Т.Н., Слободской М.И., Попов Л.Е. Моделирование источника дислокаций в поле активируемых и неактивируемых дискретных препятствий // Изв. вузов. Физика. - 1992. №10. - С. 20-24.
19. Слободской М.И., Попов Л.Е. Природа дисперсии напряжения старта источника Франка-Рида в поле случайно расположенных препятствий с дискретным спектром прочностей // Научные труды XXXI семинара "Актуальные проблемы прочности". Новгород, 1997. - Т.1. С. 257-261.
20. Слободской М.И., Матющенко А.В. Эволюция дислокационной петли от источника в поле случайно расположенных препятствий с дискретным спектром прочностей // Изв. вузов. Физика. - 1997. №7. - С. 113-118.
21. Эфрон Б. Нетрадиционные методы многомерного статистического анализа. М.: Финансы и статистика, 1988. 262 с.
22. Сантало Л. Интегральная геометрия и геометрические вероятности. - М.: Наука, 1983. - 359 с.
23. Колупаева С.Н., Старенченко В.А., Попов Л.Е. Неустойчивости пластической деформации кристаллов. Томск: Изд-во Том. ун-та, 1994. 301 с.