# О ТЕРМОАКТИВАЦИОННОМ ДВИЖЕНИИ ДИСЛОКАЦИЙ В РЕЛЬЕФЕ ПАЙЕРЛСА В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧЕК ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА

*А.Л.Корженевский*

Показано, что вблизи точек фазовых переходов первого рода в достаточно широком интервале температур имеет место значительная перенормировка энергии активации плавных парных перегибов.

Хорошо известно, сколь важную конструктивную роль при построении теории механических процессов пластической деформации, двойникования и растрескивания реальных твердых тел играет возможность их описания в терминах дислокаций различных типов [1]. Вместе с тем с прикладной точки зрения все большее значение приобретают гетерофазные материалы, многие из которых способны испытывать разнообразные фазовые переходы (ФП).

Исследование эволюции гетерофазных структур в таких материалах при изменении внешних условий требует анализа характера движения полных и (или) частичных дислокаций с обязательным учетом вкладов в обобщенные термодинамические силы от степеней свободы, связанных с параметром порядка ФП. В частности, если данный тип дислокаций изменяет локальные условия ФП и способен инициировать появление зародышей новой фазы, то вблизи точек ФП первого рода могут возникнуть аномалии в кинетике процессов пластической деформации, обусловленные движением таких «одетых» дислокаций.

Как известно, на кривых зависимости скорости дислокаций $v(\sigma)$ от приложенного внешнего напряжения $\sigma$ в логарифмических координатах наблюдаются два участка, отвечающих термически активированному (при низких $\sigma$) и динамическому (высокие $\sigma$) режимам движения дислокаций [2]. При этом скорость термоактивированного движения для кристаллов с относительно высокими барьерами Пайерлса лимитируется временем зарождения парного перегиба (ПП) критического размера, а для кристаллов с низкими барьерами Пайерлса — временем преодоления точечных дефектов. Особенности процесса термофлуктуационного движения дислокационного сегмента в поле точечных упругих центров различных типов вблизи точек ФП первого рода были исследованы в [3]. В настоящем сообщении мы проанализируем возможное изменение скорости дислокации, движущейся в рельефе Пайерлса кристалла, находящегося в окрестности точки ФП мартенситного типа.

Итак, нам нужно выяснить, как изменяются условия зарождения ПП при приближении к точке ФП первого рода. При этом в силу экспоненциальной зависимости времени зарождения ПП от его энергии $\Phi$ в первую очередь установим температурную зависимость $\Phi(T)$ при $T \to T_c$. Это нетрудно сделать, если перегиб достаточно плавный и при расчете его конфигурации и энергии можно использовать континуальное приближение. Такая ситуация имеет место в материалах, где энергия линейного натяжения дислокации много больше высоты рельефа Пайерлса $U_p$ и длина ПП $l$ может составлять десятки межатомных расстояний [4].

В качестве примера рассмотрим прямолинейную винтовую дислокацию, в отсутствие внешних напряжений лежащую в канавке периодического пайерлсовского рельефа $U_p(y)$ вдоль оси $x$. Ограничимся анализом случая простейшего дилатационного типа связи параметра порядка $M$ с тензором упругих деформаций $\varepsilon_{ik}$, когда соответствующий вклад в термодинамический потенциал кристалла

$$\Delta\Phi = qM^2 \mathrm{Sp}\varepsilon_{ik}.$$

Тогда полный термодинамический потенциал системы, включающий в себя как энергию дислокации, изогнутой за счет существования ПП флуктуационного происхождения, так и (отрицательную) свободную энергию зародыщей, образующихся за счет «одевания» повышающей локальную температуру ФП краевой компоненты ПП, можно записать в виде

$$\Phi\left(T, \{y(x)\}\right) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \left[U_0 \left(1 + (1-f)y'^2\right) \Big/ \left(1+y^2\right) + U_p(y)\right] \left(1+y'^2\right)^{1/2} - \right.$$

$$\left. - \left(U_0 + U_p(y_0)\right) - \sigma b(y - y_0) \right\} dx, \qquad (1)$$

где точка равновесного положения прямолинейной дислокации в поле внешнего напряжения $\sigma$ определяется равенством

$$-\left.\frac{\partial U_p}{\partial y}\right|_{y=y_0} = \sigma b,$$

$b$ — вектор Бюргерса, $U_0$ — энергия единицы длины дислокации вдали от точки ФП, а зависящий от температуры безразмерный параметр $f(T) > 0$ отражает вклад свободной энергии зародыша новой фазы, «одевающего» краевую компоненту ПП [5]

$$f(T) \simeq G(\partial T_c/\partial P)\varepsilon_* \Big/ (T - T_c), \qquad (2)$$

$G$ — упругий модуль, $P$ — давление, $\varepsilon_*$ — скачок деформации в точке перехода.

Поскольку мы рассматриваем случай, когда высота потенциала Пайерлса $U_p \ll U_0$, то перегиб растянут и значение $y' \ll 1$. Соответственно выражение (1) может быть переписано в виде

$$\Phi\left(T, \{y(x)\}\right) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{1}{2} - f\right) y'^2 + U_p(y) - U_p(y_0) - \sigma b(y - y_0)\right] dx. \qquad (3)$$

Используя уравнение Эйлера для функционала (3) и переходя к интегрированию по оси $y$, находим значение энергии активации ПП $\Phi_*(T)$, соответствующее состоянию неустойчивого равновесия перегиба в седловой точке

$$\Phi_*(T) = 2\left[2U_0(1-2f)\right]^{1/2} \int\limits_{y_0}^{y_{\max}} \left[\varphi(y) - \varphi(y_0)\right]^{1/2} dy, \qquad (4)$$

где функция

$$\varphi(y) \equiv U_p(y) - \sigma b y,$$

а значение $y_{\max}$ определяется нетривиальным корнем равенства $\varphi(y_{\max}) = \varphi(y_0)$.

Предполагая, что пайерлсовский потенциал слабо зависит от температуры (кроме, может быть, непосредственно самой точки $T = T_c$), из (4) сразу видим, что основной вклад в температурную зависимость энергии активации ПП обусловлен множителем $(1-2f)^{1/2}$, описывающим перенормировку сил линейного натяжения дислокационной струны в окрестности точки ФП.

Совершенно аналогично тому, как это было сделано выше для винтовой дислокации, можно показать, что в случае ПП, образующегося на «раздевающейся» при изгибе краевой дислокации, в выражении (4) для энергии активации ПП вместо $(1-2f)^{1/2}$ появляется множитель $(1+f)^{1/2}$, т.е. значение $\Phi_*(T)$ в окрестности ФП возрастает.

Сам факт уменьшения (увеличения) энергии активации ПП для двух различных типов дислокаций в нашей простой модели имеет ясный физический смысл: локальный ФП на дислокации возможен только при понижении термодинамического потенциала системы, поэтому процесс зарождения «одетого» ПП энергетически выгоден и облегчен, а обратный ему процесс — затруднен.

Обсудим теперь величину относительного изменения скорости дислокации, движущейся под действием постоянной нагрузки, при приближении к точке мартенситного ФП. В [5,6] было показано, что для протяженных прямолинейных сегментов дислокаций формула (2) правильно описывает температурную зависимость эффективного безразмерного параметра $f(T)$ при его росте вплоть до значений $f \lesssim 1/2$. При дальнейшем приближении к точке ФП зависимость (2) нарушается из-за необходимости учета вклада упругих полей, созданных неближайшими по отношению к данному зародышу элементами дислокационного ансамбля, а также вследствие возможного возникновения неустойчивости равновесных конфигураций для части дислокационных сегментов [6,7].

В рассматриваемом случае «одевания» ПП применимость формулы (2) ограничена также условием на радиус зародыша

$$\rho(T) \simeq b f(T)/\varepsilon_* < l,$$

позволяющим в качестве простой оценки упругого поля ПП использовать выражение для поля напряжений прямолинейной дислокации и пренебречь краевыми эффектами. Если для оценки принять также, что скачок спонтанной деформации $\varepsilon_* \sim 5 \cdot 10^{-3}$, энергия активации ПП вдали от точки ФП порядка 0.1 эВ [8] и температура ФП $T_c \sim 10^2$ К, то для относительного изменения логарифма скорости винтовой дислокации в окрестности точки ФП имеем

$$\ln(v_T/v_0) \simeq 10\left[1-(1-2f)^{1/2}\right], \tag{5}$$

а условие $\rho(T) < l$ выполняется для $f \lesssim 0.1$. Используя (2), (5) при $f \simeq 0.1$, находим, что при обычных значениях $(\partial T_c/\partial P) \simeq 5$ К/кбар логарифм в [5] может достигать значений порядка единицы уже при температурах $T - T_c \sim 10^2$ К от точки перехода. Так как при столь малых значениях $f(T)$ дислокационный ансамбль в целом сохраняет устойчивость и самопроизвольной генерации дислокационных петель, обусловленной наличием ФП, не происходит [6], то логарифм отношения скоростей пластической деформации вдали и вблизи точки ФП $\ln(\dot{\varepsilon}(T)/\dot{\varepsilon}_0)$ имеет тот же порядок величины. Вместе с тем при повышении $T_c$, а также уменьшении скачка $\varepsilon_*$ указанные выше аномалии пластической деформации должны проявляться слабее.

Таким образом, с одной стороны, можно ожидать обнаружения широкого температурного интервала с аномальным пластическим поведением при «благоприятных» значениях параметров ФП и самого кристалла. С другой стороны, наличие аномалий не является универсальным свойством. Необходима, следовательно, постановка целенаправленных экспериментов, включающих в себя возможность создания и сравнения результатов для одних и тех же (химически) кристаллов с существенно различной с точки зрения вероятности зарождения новой фазы дислокационной структурой.

## Список литературы


[1] Бойко В.С., Гарбер Р.И., Косевич А.М. Обратимая пластичность кристаллов. М.: Наука, 1991. 279 с.
[2] Альшиц В.И., Инденбом В.Л. // УФН. 1975. Т. 115. № 1. С. 3–39.
[3] Корженевский А.Л., Лисаченко Д.А. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 5. С. 1558–1562.
[4] Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978. 806 с.
[5] Корженевский А.Л. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 5. С. 1324–1331.
[6] Корженевский А.Л., Лисаченко Д.А. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 5. С. 1492–1494.
[7] Корженевский А.Л., Лисаченко Д.А. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 6. С. 1769–1771.
[8] Судзуки Т., Ёсинага Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. М.: Мир, 1989. 294 с.



Государственный электротехнический
университет им. В.И.Ульянова (Ленина)
Санкт-Петербург



Поступило в Редакцию
14 мая 1993 г.