07

Возникновение силы торможения типа сухого трения при динамическом скольжении краевой дислокации в кристалле, содержащем призматические дислокационные петли

© В.В. Малашенко

Донецкий физико-технический институт НАН Украины,
Донецк, Украина
Донецкий национальный технический университет,
Донецк, Украина
E-mail: malashenko@fti.dn.ua

(Поступила в Редакцию 5 апреля 2011 г.
В окончательной редакции 15 апреля 2011 г.)

Исследовано динамическое торможение краевых дислокаций призматическими дислокационными петлями. Показано, что возникновение активации в спектре колебаний движущейся краевой дислокации приводит к возникновению эффекта сухого трения. Численные оценки показывают, что при высокой концентрации петель влияние данного эффекта на динамику дислокаций может быть весьма существенным.

Как известно, пластические свойства кристаллов в значительной степени определяются особенностями движения дислокаций — линейных дефектов кристаллической структуры — и их взаимодействием с другими структурными дефектами. Потенциальные барьеры, созданные такими дефектами, движущаяся дислокация может преодолевать двумя путями в зависимости от скорости своего движения. Медленно движущиеся дислокации останавливаются перед такими барьерами и могут преодолеть их с помощью термических флуктуаций. Возрастание скорости дислокаций приводит к тому, что их кинетическая энергия превосходит высоту энергетических барьеров, создавая условия для динамического преодоления препятствий без участия термических флуктуаций. Это так называемая динамическая область скоростей, нижняя граница которой определяется неравенством $v \geq 10^{-2}c$, где c — скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле [1]. Торможение дислокаций в этой области в значительной степени определяется перекачкой энергии от дислокации к различным элементарным возбуждениям в кристалле, однако при высокой концентрации примесей и других дефектов решетки динамическое взаимодействие дислокации с этими дефектами становится весьма существенным и оказывает значительное влияние на ее подвижность, а также на свойства кристаллов, обусловленные дислокационным движением. Основанные на этом взаимодействии механизмы диссипации являются температурно-независимыми, поэтому их вклад в динамическое торможение возрастает с понижением температуры, когда фононные и магнонные механизмы „вымораживаются“, теряя свою эффективность. При высокой концентрации дефектов их влияние на динамику дислокаций может быть существенным и в области комнатных температур.

Интерес к исследованию движения дислокаций в динамической области в последние годы заметно возрос [2–5], что связано, с одной стороны, с важностью дислокационной динамики для понимания процессов, происходящих в кристаллах в области низких температур [6,7] при высокоскоростном растяжении [8] либо под действием ударных нагрузок [9–11], в частности создаваемых коротковолновым лазерным излучением огромной мощности [12–14], с другой — с интенсивным применением в этой области метода молекулярной динамики [15–17]. Динамическое поведение дислокаций влияет также на формирование свойств металлов при использовании нового перспективного метода сварки — сварки взрывом [18].

Как было отмечено выше, существенное влияние на динамическое движение дислокаций оказывает их взаимодействие со структурными дефектами. Одним из наиболее важных и часто встречающихся типов дефектов кристаллической структуры являются дислокационные петли, которые могут образовываться в кристалле (например, при радиационном облучении материалов [19], отжиге и закалке [20]) и оказывают существенное влияние на скольжение прямолинейных дислокаций, а следовательно, и на механические свойства кристаллов [20,21]. Теоретическому исследованию дислокационных петель посвящено значительное количество работ (см., например, [15,16,22–25]).

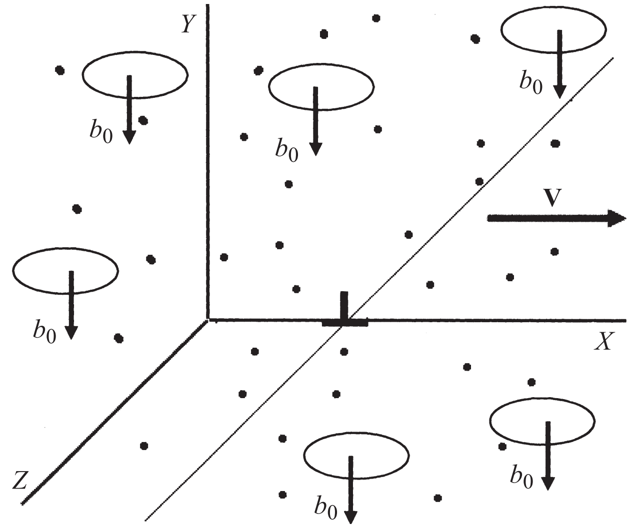
Взаимодействие неподвижных дислокационных петель с неподвижными дислокациями детально изучено в монографии [25]. Авторы работы [15] использовали метод дискретной дислокационной динамики для анализа взаимодействия дислокационной сетки с призматической дислокационной петлей. В работах [16,26–28] методами молекулярной динамики исследовалось взаимодействие движущейся краевой дислокации с петлями в железе, меди и α-цирконии. Вопрос об ориентационной зависимости этого взаимодействия детально проанализирован в работе [29]. Работа [30] посвящена теоретическому исследованию движения краевой дислокации в упругом поле структурных дефектов различного масштаба: дислокационных петель и точечных дефектов. Было показано, что в этом случае при определенных условиях график зависимости полной силы динамического торможения дислокации может иметь два минимума и два максимума, при этом положение максимумов соответствует максимальному значению торможения каждым из указанных типов дефектов, а минимумы отвечают тем значениям скоростей, при которых происходит переход от доминирования одного типа дефектов к доминированию другого типа. Исследуемый в этой работе механизм диссипации заключался в необратимом переходе кинетической энергии поступательного движения дислокации в энергию ее изгибных колебаний в плоскости скольжения. Как следует из работ [31–33], динамика дислокаций при наличии такого механизма диссипации зависит от вида спектра дислокационных колебаний. В настоящей работе показано, что наличие щели в спектре колебаний дислокации, движущейся в упругом поле круговых дислокационных петель, при определенных условиях приводит к возникновению сухого трения не только в случае, рассмотренном в работе [30], но и в ряде других случаев, в частности при движении в кристалле дислокационной пары при движении одиночной дислокации в приповерхностной области.

Реальные кристаллы обычно содержат два или несколько типов дефектов, влияние которых на скольжение дислокаций определяется их концентрацией и мощностью. Для начала проанализируем случай, исследованный в работе [30], — скольжение дислокаций в упругом поле дефектов, имеющих не только разную размерность, но и разный характерный размер. Речь пойдет о дислокационных петлях и точечных дефектах. Для точечных дефектов характерным масштабом является их радиус, по порядку величины сравнимый с постоянной решетки. Для петель — это радиус петли, который может превышать радиус точечного дефекта на порядок и более.

Пусть бесконечная краевая дислокация совершает скольжение под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 в положительном направлении оси OX с постоянной скоростью v (см. рисунок). Линия дислокации параллельна оси OZ, вектор Бюргерса дислокации параллелен оси OX. Плоскость скольжения дислокации совпадает с плоскостью XOZ, а ее положение определяется функцией

$$X(y=0,z,t) = vt + w(y=0,z,t). \qquad (1)$$

Плоскости дислокационных петель параллельны плоскости скольжения дислокации, а их центры распределены в кристалле случайным образом. Рассмотрим случай, когда все дислокационные петли являются призматическими. Для простоты все петли будем считать одинаковыми, то есть имеющими одинаковые радиусы, равные a, и одинаковые векторы Бюргерса $\mathbf{b}_0 = (0, -b_0, 0)$, параллельные оси OY. Уравнение движения дислокации может



Движение краевой дислокации в кристалле, содержащем точечные дефекты и призматические дислокационные петли.

быть представлено в следующем виде:

$$m\left\{\frac{\partial^2 X}{\partial t^2} - c^2\frac{\partial^2 X}{\partial z^2}\right\} = b[\sigma_0 + \sigma_{xy}^d + \sigma_{xy}^L] - B\,\frac{\partial X}{\partial t}, \qquad (2)$$

где σ_{xy}^d — компонента тензора напряжений, создаваемых точечными дефектами на линии дислокации, σ_{xy}^L — компонента тензора напряжений, создаваемых на этой линии призматическими петлями, B — константа демпфирования, обусловленная фононными, магнонными или электронными механизмами диссипации, m — масса единицы длины дислокации, c — скорость распространения в кристалле поперечных звуковых волн.

Здесь, как и в работах [29–33], будем считать выполненным условие $[Bbv/(mc^2)] \ll 1$, позволяющее пренебречь влиянием константы B на силу торможения дислокации структурными дефектами.

Сила динамического торможения движущейся краевой дислокации призматическими дислокационными петлями, согласно [30], может быть вычислена по формуле

$$F_L = \frac{n_L b^2}{8\pi^2 m}\int d^3q|q_x|\cdot\left|\sigma_{xy}^L(\mathbf{q})\right|^2\delta\big(q_x^2v^2 - \omega^2(q_z)\big), \qquad (3)$$

где $\omega(q_z)$ — спектр дислокационных колебаний, n_L — объемная концентрация петель.

В рассматриваемом нами случае спектр дислокационных колебаний имеет вид

$$\omega^2(q_z) = c^2q_z^2 + \Delta^2. \qquad (4)$$

В работе [30] щель Δ в колебательном спектре возникает благодаря коллективному взаимодействию дефектов с дислокацией и, согласно [31], описывается формулой

$$\Delta = \Delta_{\text{def}} = \frac{c}{b}\left(n_{0d}\varepsilon^2\right)^{1/3} \approx \frac{c}{l_d}, \qquad (5)$$

где ε — параметр несоответствия дефекта, l_d — среднее расстояние между точечными дефектами, случайным образом распределенными в объеме кристалла, n_{0d} — безразмерная концентрация этих дефектов. Наличие щели существенно изменяет характер торможения дислокации петлями, в частности скоростная зависимость этой силы становится немонотонной. После несложных преобразований выражение для искомой силы торможения может быть представлено в виде

$$F_L = \frac{n_L b^2}{4\pi^2 m c v} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dq_y \cdot \int\limits_{\frac{\Delta}{v}}^{\infty} dq_x q_x \frac{\left|\sigma_{xy}^L(q_x, q_y, 0)\right|^2}{\sqrt{q_x^2 - \frac{\Delta^2}{v^2}}}. \qquad (6)$$

В работе [30] были получены приближенные аналитические выражения этой силы для различных скоростных интервалов динамической области. Далее мы будем анализировать интервал скоростей $v < v_L$, где величина характерной скорости v_L определяется, согласно [30], выражением $v_L = a\Delta$. Для случая, когда щель создается коллективным воздействием точечных дефектов, выражение для этой скорости примет вид

$$v_L = a\Delta_d = c\,\frac{a}{b}\left(n_{0d}\varepsilon^2\right)^{1/3} \approx c\,\frac{a}{l_d}. \qquad (7)$$

Сила торможения в этом интервале скоростей, согласно [30], приближенно может быть описана следующим выражением

$$F_L \approx \frac{n_L \mu b_0^2 a c}{(1-\gamma)^2 \Delta}. \qquad (8)$$

Здесь μ — модуль сдвига, γ — коэффициент Пуассона. Это и есть сила сухого трения, т.е. сила торможения, не зависящая от величины скорости. Возникновение эффекта сухого трения при торможении движущихся дислокаций дислокационными петлями определяется двумя главными факторами: видом упругого поля дислокационных петель и наличием щели в спектре колебаний движущейся дислокации. Величина щели должна быть такой, чтобы выполнялось условие $v < v_L$, но при этом скорость дислокационного скольжения должна попадать в область динамического торможения, т.е. должны быть справедливы неравенства

$$10^{-2}c < v < v_L = a\Delta. \qquad (9)$$

Таким образом, для возникновения эффекта сухого трения существенным являются наличие и величина спектральной щели, происхождение же этой щели принципиального значения не имеет. В работе [30] щель возникала в результате коллективного взаимодействия точечных дефектов с движущейся краевой дислокацией и имела вид, определяемый формулой (5). Сама же сила динамического торможения в этом случае после несложных преобразований может быть описана выражением

$$F_L = \frac{n_L \mu b b_0^2 a}{(1-\gamma)^2\left(n_{0d}\varepsilon^2\right)^{1/3}} \approx \frac{n_L \mu b_0^2 a l_d}{(1-\gamma)^2}. \qquad (10)$$

Как следует из полученного выражения, сила динамического торможения краевой дислокации призматическими петлями в исследуемой области скоростей зависит не только от концентрации петель, но и от концентрации точечных дефектов: увеличение концентрации этих дефектов приводит к увеличению размеров спектральной щели, а следовательно, к уменьшению силы торможения дислокации петлями.

Выполним численные оценки, чтобы убедиться, что исследуемые нами скорости не выходят за границы динамической области. Для типичных значений $\varepsilon \approx 10^{-1}$, $a \approx 10b$, $b \approx 3 \cdot 10^{-10}$ m, $c \approx 3 \cdot 10^3$ m/s и $n_{0d} \approx 10^{-4}$ получим $v_L \approx 10^{-1}c \approx 300$ m/s, т.е. скорости $v < v_L$, при которых возникает эффект сухого трения, находятся в динамическом скоростном интервале. Если же размер петель $a \approx 100b$, то при той же концентрации точечных дефектов получим $v_L \approx c$, т.е. возникновение данного эффекта становится возможным практически при любых скоростях динамической области.

Итак, как было отмечено выше, для реализации эффекта сухого трения необходимо наличие щели в спектре дислокационных колебаний. Эта щель может возникнуть, в частности, благодаря взаимодействию дислокаций, составляющих подвижную дислокационную пару. Зарождение и движение таких пар весьма характерно для стадии легкого скольжения, особенно при больших деформациях или при локальном действии изгибающих моментов [20]. Колебательный спектр дислокаций, образующих пару, был получен в работе [34]. Возникающая в дислокационном спектре щель в этом случае имеет вид

$$\Delta = \Delta_{\text{dis}} = \frac{b}{d}\sqrt{\frac{M}{m}} = \frac{c}{d}\sqrt{\frac{2}{\ln(D/l_{\text{dis}})}} \approx \frac{c}{d};$$

$$M = \frac{\mu}{2\pi(1-\gamma)}, \qquad (11)$$

где l_{dis} — длина дислокации, D — величина порядка размеров кристалла, d — расстояние между плоскостями скольжения, в которых движутся краевые дислокации, образующие дислокационную пару. При динамическом скольжении такой пары в поле неподвижных дислокационных петель сухое трение может быть реализовано при скоростях $v < v_L = a\Delta_{\text{dis}} \approx c(a/d)$. Оценим порядок величины критической скорости v_L в этом случае. Очевидно, что для $a \approx d$ получим $v_L \approx c$, т.е. возникновение исследуемого эффекта возможно во всей области динамического движения. Для значений $a \approx 100b$ и $d \approx 10b$ получим значение скорости v_L, превышающее скорость звука. Это означает, что условие реализации эффекта $v < v_L$ также будет выполнено во всем динамическом диапазоне скоростей, а скорость v_L в этом случае вообще не достижима. Если же $a \approx 10b$ и $d \approx 100b$, получим $v_L \approx 10^{-1}c$, т.е. область скоростей, в которой возможен данный эффект, значительно сужается.

Воспользовавшись формулами (8) и (11), получим выражение для силы динамического торможения дислокаций призматическими петлями в рассматриваемом случае

$$F_L = \frac{n_L \mu b_0^2 a d}{(1-\gamma)^2}\sqrt{\frac{\ln(D/l_{\text{dis}})}{2}} \approx \frac{n_L \mu b_0^2 a d}{(1-\gamma)^2}. \qquad (12)$$

Щель в спектре дислокационных колебаний может возникать также благодаря действию сил изображения при скольжении дислокации параллельно свободной поверхности. Этот случай был детально проанализирован в работе [32], в которой было показано, что движение краевой дислокации параллельно поверхности кристалла в некотором смысле эквивалентно движению пары дислокаций — реальной дислокации и ее изображения. Возникающая в этом случае спектральная щель определяется, согласно [32], выражением

$$\Delta = \Delta_S = \frac{b}{l_S}\sqrt{\frac{M}{2m}} \approx \frac{c}{l_S}. \qquad (13)$$

Здесь l_S — расстояние от свободной поверхности кристалла до плоскости скольжения дислокации. Тогда для силы динамического торможения краевых дислокаций в этом случае получим следующую формулу:

$$F_L = \frac{n_L \mu b_0^2 a l_S}{(1-\gamma)^2}\sqrt{\frac{\ln(D/l_{\mathrm{dis}})}{4}} \approx \frac{n_L \mu b_0^2 a l_S}{(1-\gamma)^2}. \qquad (14)$$

Обобщая все рассмотренные выше случаи, приходим к выводу, что возникающую в них силу торможения типа сухого трения можно приближенно представить в виде

$$F_L = F_0\,\frac{L}{a}; \quad F_0 \approx \frac{n_L \mu b_0^2 a^2}{(1-\gamma)^2}. \qquad (15)$$

Здесь L — характерный масштаб взаимодействия, порождающего спектральную щель. Если щель возникает в результате коллективного взаимодействия точечных дефектов с дислокацией, L имеет смысл среднего расстояния между дефектами ($L = l_d$); если причиной появления щели является взаимодействие дислокаций, образующих подвижную пару, это расстояние между дислокациями ($L = d$); если же она появляется в результате действия сил изображения, то характерным масштабом является расстояние между поверхностью и плоскостью дислокационного скольжения ($L = l_S$).

Таким образом, проведенный анализ позволяет сделать вывод, что появление щели в спектре дислокационных колебаний приводит к тому, что динамическое торможение краевых дислокаций призматическими дислокационными петлями приобретает характер сухого трения. Его величина определяется как концентрацией и размерами дислокационных петель, так и характерным масштабом взаимодействия, порождающего спектральную щель.

В реальных кристаллах дислокационные петли довольно часто располагаются в параллельных плоскостях. Будем считать эти плоскости эквидистантными (расстояние между ними обозначим D_S), а среднюю концентрацию петель в каждой плоскости — примерно одинаковой и равной n_S (число дислокационных петель, приходящихся на единицу площади). Воспользовавшись результатами работы [29], выражение (15) для силы сухого трения представим в следующем виде:

$$F_L = F_0\,\frac{L}{a}, \quad F_0 \approx \frac{n_S \mu b_0^2 a^4}{D_S^3(1-\gamma)^2} = \frac{n_{0S} \mu b_0^2 a^2}{D_S^3(1-\gamma)^2}. \qquad (16)$$

Здесь $n_{0S} = n_S a^2$ — безразмерная концентрация петель на плоскости.

Для численных оценок величины исследуемого эффекта воспользуемся данными работ [29,31,35]. Пусть краевая дислокация движется в кристалле, содержащем дислокационные петли и точечные дефекты. Для типичных значений $\mu = 5 \cdot 10^{10}$ Pa, $b = 3 \cdot 10^{-10}$ m, $a = 100b$, $D_S = 30b$, $\gamma = 0.3$, $n_{0S} = 10^{-3}$ получим значение $F_0 \approx 8 \cdot 10^{-3}$ N/m. При значении безразмерной концентрации точечных дефектов $n_0 = 10^{-4}$ среднее расстояние между ними составляет $L = l_d \approx 20b$. Тогда сила торможения дислокации петлями примерно равна $F_L \approx 1 \cdot 10^{-3}$ N/m. Для сравнения оценим силу торможения дислокации фононами в области комнатных температур. Для типичного значения фононной константы демпфирования $B = 10^{-4}\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$ и скорости дислокационного скольжения $v = 10^{-2}c \approx 30$ m/s получим, что сила фононного торможения дислокации составляет $F \approx 3 \cdot 10^{-3}$ N/m. Таким образом, при высокой концентрации петель сила сухого трения по порядку величины сопоставима с силой фононного торможения дислокаций, которая в области комнатных температур является обычно доминирующей. При повышении скорости дислокационного скольжения влияние исследуемой силы понижается, поскольку сила фононного торможения пропорциональна скорости, а сила сухого трения от нее не зависит. При понижении температуры роль сухого трения возрастает, поскольку этот механизм диссипации является температурно-независимым, а эффективность фононных механизмов рассеяния значительно снижается.

Таким образом, эффект сухого трения, обусловленный динамическим взаимодействием дислокаций с дислокационными петлями, способен оказывать существенное влияние на скольжение дислокаций, особенно в области низких температур.

Список литературы

[1] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. УФН **115**, 1 (1975).
[2] J.H. Cantrell. J. Appl. Phys. **105**, 043 520 (2009).
[3] Ю.А. Баимова, С.В. Дмитриев, А.А. Назаров, А.И. Пшеничнюк. ФТТ **51**, 1705 (2009).
[4] А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ДАН **420**, 467 (2008).
[5] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. ФТТ **51**, 2309 (2009).
[6] В.Д. Нацик, В.П. Солдатов, Г.И. Кириченко, Л.Г. Иванченко. ФНТ **35**, 637 (2009).
[7] Н.В. Исаев, В.Д. Нацик, В.В. Пустовалов, В.С. Фоменко, С.Э. Шумилин. ФНТ **31**, 1177 (2005).
[8] А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин. ДАН **413**, 615 (2007).
[9] M. Molotskii. Appl. Phys. Let. **93**, 051 905 (2008).
[10] Г.И. Канель, В.Е. Фортов, С.В. Разоренов. УФН **177**, 809 (2007).

[11] В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ЖЭТФ **13**, 1064 (2007).
[12] D. Batani, H. Stabile, A. Ravasio, G. Lucchini, F. Strati, T. Desai, J. Ullschmied, E. Krousky, J. Skala, L. Juha, B. Kralikova, M. Pfeifer, Ch. Kadlec, T. Mocek, A. Präg, H. Nishimura, Y. Ochi. Phys. Rev. E **68**, 067 403 (2003).
[13] D. Batani, F. Strati, H. Stabile, M. Tomasini, G. Lucchini, A. Ravasio, M. Koenig, A. Benuzzi-Mounaix, H. Nishimura, Y. Ochi, J. Ullschmied, J. Skala, B. Kralikova, M. Pfeifer, Ch. Kadlec, T. Mocek, A. Präg, T. Hall, P. Milani, E. Barborini, P. Piseri. Phys. Rev. Lett. **92**, 065 503 (2004).
[14] Y. Wang, Z.-K. Liu, L.-O. Chen, L. Burakovsky, D.L. Preston, W. Luo, B. Johansson, R. Ahuja. Phys. Rev. B **71**, 054 110 (2005).
[15] K. Yashiro, M. Konishi, Y. Tomita. Computational Material Science **43**, 481 (2008).
[16] R. Novokshanov, S. Roberts. J. Nuclear Mat. **386**, 64 (2009).
[17] А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ФТТ **50**, 1984 (2008).
[18] В.Г. Петушков. Применение взрыва в сварочной технике. Наук. думка, К. (2005). 775 с.
[19] В.В. Слезов, А.В. Субботин, О.А. Осмаев. ФТТ **47**, 463 (2005).
[20] Ж. Фридель. Дислокации. Мир, М. (1967). 644 с.
[21] Г.А. Малыгин. ФТТ **49**, 961 (2007).
[22] J. Dundurs, N.J. Salamon. Phys. Status Solidi B **50**, 125 (2006).
[23] V.V. Chaldyshev, A.L. Kolesnikova, N.A. Bert, A.E. Romanov. J. Appl. Phys. **97**, 024 309 (2005).
[24] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. ФТТ **45**, 1626 (2003).
[25] Л.И. Миркин. Физические основы прочности и пластичности. Изд. МГУ, М. (1968). 540 с.
[26] Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon, Z. Rong, B.N. Singh. Phil. Mag. Lett. **84**, 745 (2004).
[27] Z. Rong, D.J. Bacon, Yu.N. Osetsky. Mater. Sci. Eng. A **400**, 378 (2005).
[28] R.E. Voskoboynikov, Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon. Materials Sci. Eng. A **400**, 54 (2005).
[29] В.В. Малашенко. ФТТ **50**, 1788 (2008).
[30] V.V. Malashenko. Physica B: Phys. Cond. Mat. **404**, 3890 (2009).
[31] В.В. Малашенко. ФТТ **49**, 78 (2007).
[32] В.В. Малашенко. ФТТ **51**, 703 (2009).
[33] V.V. Malashenko. Modern Phys. Lett. B. **23**, 2041 (2009).
[34] В.В. Малашенко. ФТТ **48**, 433 (2006).
[35] Ф.Ф. Сатдарова. Кристаллография **50**, 472 (2005).