УДК 539.4.01

КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ АННИГИЛЯЦИОННЫХ КАНАЛОВ В ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЕ ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ

Г. А. Малыгин

Теоретически обсуждается механизм образования бездислокационных каналов (каналов Люфта) в дислокационной структуре предварительно деформированных при низкой температуре кристаллов. Анализ основан на решении нелинейного уравнения эволюции локальной плотности дислокаций в кристалле. Уравнение включает в себя процессы размножения, аннигиляции и диффузии дислокаций. Найдено, что для возникновения каналов необходимо выполнение некоторых критических условий. Получено стационарное решение уравнения, описывающее пространственно-периодическое распределение каналов в кристалле. Теоретические результаты сопоставляются с имеющимися в литературе данными по бездислокационным каналам в кристаллах молибдена.

Возникновение протяженных бездислокационных каналов шириной порядка нескольких микрон в однородной дислокационной структуре предварительно деформированных при более низкой температуре кристаллах молибдена было обнаружено в [1-3]. В дальнейшем это явление получило развитие и подтверждение в опытах на усталость [4, 5] и при электроискровой эррозии [6] молибдена. Во всех случаях последующая пластическая деформация осуществлялась в условиях, когда в кристаллическом образце при более низкой температуре была предварительно сформирована однородная дислокационная структура.

Полное или почти полное отсутствие дислокаций в каналах указывает на то, что их возникновение связано с процессом аннигиляции дислокаций, развивающимся при достаточно низких гомологических температурах (0.15—0.2) T_m, где T_m — температура плавления. В [7, 8] предложен чисто силовой механизм образования таких каналов. Основным его элементом является плоская группа дислокаций одного знака, которая движется по кристаллу, вызывая разрушение и аннигиляцию дислокационных диполей. Существование таких мощных групп дислокаций является недостаточно обоснованным моментом модели, если учитывать легкость поперечного скольжения дислокаций в ОЦК металлах в рассматриваемом диапазоне температур.

В настоящей работе будет развита кинетическая модель явления, основанная на уравнениях дислокационной кинетики, описывающих эволюцию локальной плотности дислокаций в кристалле. Кинетический подход был ранее успешно применен для анализа механизмов формирования различных пространственно-неоднородных распределений дислокаций в кристаллах, таких как ячеистая [9, 10] и разориентированная ячеистая [11] дислокационные структуры, а также механизма образования полос сброса [12]. Аннигиляционные каналы, как можно предполагать, также являются результатом определенным образом развивающейся эволюции дислокационного ансамбля в кристалле при заданных условиях его деформирования.

1. Аннигиляционная неустойчивость дислокационной структуры

На рис. 1, *а* приведена схема опытов [1, 2]. После деформации при температуре $T_1 \leqslant 0.1\,T_m$ (кривая *1*; для Mo $T_1 \leqslant 290$ K) и образования однородной дислокационной структуры кристалл деформировался при температуре $T_2 \geqslant 0.15 T_m$ (493 K). Кривая *2* демонстрирует схематически полученную при этом зависимость напряжений течения τ от величины пластической деформации γ. Характерными особенностями кривой являются наличие на ней падающего участка *bc* и возникновение на этом участке многочисленных скачков нагрузки, связанных с образованием в однородной дислокационной структуре кристалла бездислокационных каналов [1, 2]. Нормальная кривая упрочнения при этой температуре исходного, предварительно недеформированного кристалла имеет трехстадийный характер и не содержит скачков нагрузки (кривая *3*). На второй и третьей стадиях в образце возникает обычная ячеистая дислокационная структура.

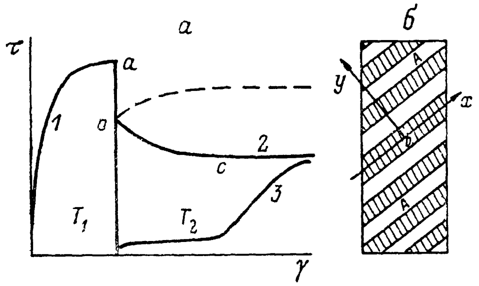

Рис. 1. Схема опытов [1, 2] (*а*), *A* — аннигиляционные каналы (*б*).

Появление падающего участка *bc* на кривой *2* свидетельствует о процессе динамического разупрочнения предварительно сформированной при низкой температуре дислокационной структуры. Известно, что в металлах с ОЦК решетками при $T < 0.1 T_m$ в структуре преобладают винтовые дислокации [13, 14], поэтому наблюдаемое при температуре T_2 разупрочнение связано, во-первых, со снижением напряжений трения Пайерлса для движения винтовых дислокаций (рис. 1, *а*; скачок напряжения *ab*); во-вторых, с процессом их аннигиляции, поскольку коэффициент аннигиляции винтовых дислокаций в ОЦК металлах резко возрастает при температурах выше $0.1 T_m$ [15]. Что касается краевых диполей, то процесс их дезинтеграции и аннигиляции в этой области температур может осуществляться силовыми механизмами, обсуждаемыми в [16, 17].

Для анализа процесса аннигиляционного разупрочнения дислокационной структуры на участке *bc* кривой *2* (рис. 1, *а*) уравнение эволюции локальной плотности дислокаций в кристалле ρ [9–12] запишем в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\xi - 1)\,\lambda_D v \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} = \left(\varkappa_f \rho_f^{1/2} - \varkappa_a \rho\right) b v \rho, \qquad (1)$$

где t — время, v — скорость дислокаций, b — вектор Бюргерса, ξ — коэффициент размножения диффузионного потока в поперечном к плоскости скольжения дислокаций направлении y (рис. 1, *б*), λ_D — соответствующее диффузионное расстояние [18], $\varkappa_f$ — коэффициент размножения дислокаций на дислокациях «леса» [19], $\varkappa_a$ — коэффициент аннигиляции дислокаций [15, 19]. При записи уравнения мы пренебрегли размножением дислокаций на препятствиях недислокационной природы ввиду более высокой по сравнению с ними плотности дислокаций «леса» $\rho_f \approx \rho_0$ в дислокационной структуре, где $\rho_0 \approx 10^{10}$ см$^{-2}$ — плотность дислокаций в предварительно деформированном образце.

Рассмотрим вначале случай однородной по кристаллу аннигиляции дислокаций. В условиях деформирования с постоянной скоростью $\partial\rho/\partial t = (\partial\rho/\partial\gamma)\,\dot\gamma$, где $\dot\gamma = bv\rho$ — скорость пластической деформации. Поэтому, принимая во внимание, что в (1) $\rho_f \approx \rho_0$, имеем уравнение для эволюции однородной плотности дислокаций

$$\partial\rho/\partial\gamma = \varkappa_f \rho_0^{1/2} - \varkappa_a \rho. \qquad (2)$$

Интегрируя его, находим

$$\rho(\gamma)=\rho_\infty+(\rho_0-\rho_\infty)\, e^{-\varkappa_a\gamma}, \quad \rho_\infty=(\varkappa_f/\varkappa_a)\,\rho_0^{1/2}. \tag{3}$$

Штриховая линия и кривая *2* (рис. 1, *а*) — зависимости напряжений течения $\tau=\alpha\mu b\rho^{1/2}$ от γ, согласно (3), при начальной плотности дислокаций соответственно $\rho_0<\rho_\infty$, $\rho_0>\rho_\infty$, где ρ_∞ — равновесная плотность дислокаций при $\gamma\to\infty$, α — коэффициент взаимодействия дислокаций, μ — модуль сдвига. Как видно из этого рисунка, аннигиляционное разупрочнение имеет место, если величина $\psi_\infty=\rho_\infty/\rho_0$ меньше единицы.

Величину параметра ψ_∞, характеризующего, согласно (3), интенсивность процесса аннигиляции дислокаций, можно определить, зная начальное $\tau_0=\alpha\mu b\rho_0^{1/2}$ и равновесное $\tau_\infty=\alpha\mu b\rho_\infty^{1/2}$ значения напряжений течения. Напряжению τ_∞ соответствует плато на кривой *2* на рис. 1, *а*.[1] Таким образом,

$$\psi_\infty=\rho_\infty/\rho_0=(\tau_\infty/\tau_0)^2, \qquad \psi_\infty=\varkappa_f/\varkappa_a\rho_0^{1/2}. \tag{4}$$

Из данных [1, 2] находим, что при $T_1=173$, $T_2=413$ и 493 K величина ψ_∞ соответственно равна 0.6 и 0.5. Более низкое значение ψ_∞ при 493 K обусловлено ростом коэффициента аннигиляции дислокаций при повышении температуры [15].

Из результатов [1, 2] следует также, что если при 413 K аннигиляция протекает практически однородно по объему кристалла, то при 493 K в дислокационной структуре возникают многочисленные бездислокационные каналы, что свидетельствует о локальной неустойчивости структуры при этой температуре к процессу аннигиляции дислокаций. Для анализа неустойчивости линеаризуем уравнение (1), после чего, подставляя в него флуктуацию локальной плотности дислокаций стандартного вида $\rho-\rho_0=\delta\rho\sim e^{\omega t+iqx}$ и учитывая (2) и обозначения (3), получим выражение для инкремента нарастания флуктуации

$$\omega=\left[\varkappa_a(\rho_\infty-\rho_0)+(\xi-1)\left(\lambda_D/b\right)q^2\right]bv, \tag{5}$$

из которого следует, что при $\xi>1$ и $\rho_\infty<\rho_0$ однородная дислокационная структура оказывается неустойчивой к флуктуациям плотности с размерами $\lambda=\pi/q$, меньшими, чем

$$\lambda_c=\pi\left[(\xi-1)(\lambda_D/b)/\varkappa_a(\rho_0-\rho_\infty)\right]^{1/2}, \quad \rho_\infty<\rho_0. \tag{6}$$

При $\lambda_D/b\approx 1$, $\xi=2$ [18], $\varkappa_a=5\div 6$ [15], $\psi_\infty=\rho_\infty/\rho_0=0.5$ находим $\lambda_c\approx\rho_0^{-1/2}$. Дальнейшая эволюция этих флуктуаций определяется нелинейным уравнением (1).

2. Аннигиляционные каналы

Рассмотрим стационарные $\partial\rho/\partial t=0$ решения уравнения (1) при $\rho_f=\rho_0$ и общем граничном условии однородности исходной дислокационной структуры $(\partial\rho/\partial x)_{\rho=\rho_0}=0$. Вводя безразмерные переменные

$$\psi=\rho/\rho_0, \quad Y=y/\Lambda_0, \quad \Lambda_0=\left[(\xi-1)\lambda_D/b\varkappa_a\rho_0\right]^{1/2}, \tag{7}$$

получаем из (1) уравнение для стационарной плотности дислокаций

$$\frac{d^2\psi}{dY^2}=(\psi_\infty-\psi)\,\psi, \qquad \left.\frac{d\psi}{dY}\right|_{\psi=1}=0. \tag{8}$$

Интегрируя его один раз и удовлетворяя граничному условию, имеем

$$^3/_2\,(d\psi/dY)^2=W(\psi)=(1-\psi)\left[(1-{}^3/_2\,\psi_\infty)(1+\psi)+\psi^2\right]. \tag{9}$$

---

[1] В реальных условиях плато (точка *с* на кривой *2*) соответствует слабый минимум на кривой $\tau(\gamma)$ [1, 2].

Общим решением (9) является эллиптический интеграл первого рода [20]

$$\delta^{-1}F(\theta,\ k)=\int\limits_{\psi}^{\psi_n}\frac{d\psi}{\sqrt{W(\psi)}}=\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}\frac{y}{\Lambda_0}. \tag{10}$$

Частные решения интеграла зависят от величины бифуркационного параметра $\psi_\infty=\varkappa_f/\varkappa_a\rho_0^{1/2}$, определяющего величину ψ_n и число действительных корней кубического уравнения $W(\psi)=0$, а также модуль k и коэффициент δ интеграла (10). Параметр ψ_∞ характеризует интенсивность процесса аннигиляции дислокаций при данной температуре опыта ($\varkappa_a=\varkappa_a(T)$).

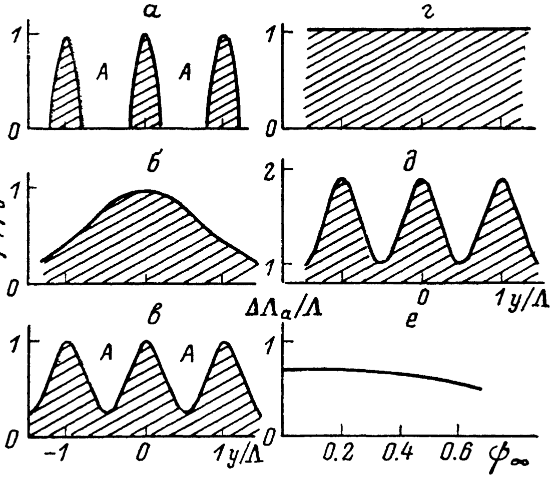

Рис. 2. Эволюция аннигиляционных дислокационных структур, согласно (10), с ростом величины параметра $\psi_\infty=0.5$ (*а*), 2/3 (*б*), 0.7 (*в*), 1.0 (*г*), 1.5 (*д*) и зависимость от ψ_∞ относительной доли каналов в дислокационной структуре (*е*).

Анализ показывает, что при $0<\psi_\infty<2/3$ кубическое уравнение имеет один действительный корень $\psi_1=1$. Интеграл (10) описывает при этом пространственно-периодическую аннигиляционную структуру (рис. 2, *а*) с периодом

$$\Lambda=4\,(3/2)^{1/2}\,\delta^{-1}F(\pi/2,\ k)\,\Lambda_0\approx 10\left[(\xi-1)\,\lambda_D/b\varkappa_a\rho_0\right]^{1/2} \tag{11}$$

и отношением ширины аннигиляционных каналов $\Delta\Lambda_a$ к периоду структуры, равным

$$\Delta\Lambda_a/\Lambda=1-F(\theta_0,\ k)/2F(\pi/2,\ k), \tag{12}$$

где

$$\cos\theta=\frac{\delta^2-1+\psi}{\delta^2+1-\psi},\quad \cos\theta\,|_{\psi=0}=\cos\theta_0,\quad k^2=\frac{1}{2}+\frac{3}{8}\,\frac{2-\psi_\infty}{\delta^2},\quad \delta^2=\sqrt{3\,(1-\psi_\infty)}. \tag{13}$$

Из (12) следует, что при изменении ψ_∞ от нуля до $\psi_\infty=2/3$ относительная доля каналов $\Delta\Lambda_a/\Lambda$ в структуре изменяется мало, в пределах от 0.67 до 0.5 (рис. 2, *е*). При $\psi_\infty=0.5$ величина $\Delta\Lambda_a/\Lambda\approx0.6$. На рис. 3 приведены экспериментальные данные для Mo, подтверждающие этот вывод: несмотря на то что ширина каналов в зависимости от конкретных условий опыта изменяется в широких пределах от 0.5 до 2.5 мкм, относительная их доля в структуре составляет 50—60 %. Отметим также, что, поскольку в поликристаллических образцах плотность дислокаций обычно выше, чем в монокристаллах, более узкие каналы в поликристалле (рис. 3, *з*) обусловлены, согласно (11), тем, что ширина каналов $\Delta\Lambda_a\sim\Lambda\sim\rho_0^{-1/2}$.

При критическом значении $\psi_\infty=2/3$ уравнение $W(\psi)=0$ имеет три действительных корня $\psi_1=1$, $\psi_2=\psi_3=0$. Интеграл (10) описывает в этом случае промежуточную неустойчивую аннигиляционную структуру солитоноподобного вида (рис. 2, *б*)

$$\rho = \rho_0 / \mathrm{ch}^2 (y/\Lambda), \qquad \Lambda = \sqrt{6}\, \Lambda_0 \tag{14}$$

Дальнейшее снижение интенсивности процесса аннигиляции и рост параметра ψ_∞ в интервале $2/3 < \psi_\infty < 1$ приводят к появлению трех различных действительных корней $\psi_1 = 1$, $0 < \psi_2 < 1$, $\psi_3 < 0$ и формированию в кристалле аннигиляционных каналов с конечной плотностью дислокаций $\rho_2 = \psi_2 \rho_0$ в них (рис. 2, *в*). При $\psi_\infty = 1$ кубическая форма $W(\psi)$ отрицательна при всех $\psi > 0$. Это означает, что дислокационная структура из-за равновесия процессов размножения и аннигиляции дислокаций ($\rho_\infty = \rho_0$) остается однородной и стабильной (рис. 2, *г*). Наконец, при $\psi_\infty > 1$ размножение дислокаций начинает преобладать над их аннигиляцией и в кристалле возникает ячеистая дислокационная структура с плотностью дислокаций в объеме ячеек $\rho = \rho_0$ и в границах ячеек $\rho > \rho_0$ (рис. 2, *д*).

Таким образом, результаты работы показывают, что для возникновения бездислокационных каналов необходимо, чтобы величина параметра $\psi_\infty = \varkappa_f / (\varkappa_a \rho_0^{1/2})$, характеризующего интенсивность процесса аннигиляции дислокаций при температуре T_2, была достаточно мала ($\psi_\infty < 2/3$). В металлах с ОЦК решеткой (Ta, Nb) в интервале температур (0.15—0.2) T_m величина $\varkappa_a \approx$

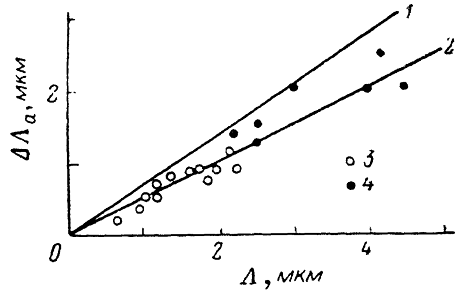

Рис. 3. Зависимость ширины каналов $\Delta\Lambda_a$ от среднего расстояния между ними Λ согласно (12).

1 — $\psi_\infty = 0$, *2* — $\psi_\infty \leqslant 2/3$. Экспериментальные точки: *3* — поликристалл Mo [3], *4* — монокристалл Mo [5].

$= 5 \div 6$ [15], следовательно, при $\rho_0 = 10^{10}$ см$^{-2}$, $b\varkappa_f = 10^{-2}$ [19] и $b = 0.27$ нм (Mo) имеем оценку $\psi_\infty = 0.6 \div 0.7 \leqslant 2/3$, которая удовлетворительно согласуется с результатами [1, 2]. Если учесть, что равновесная плотность дислокаций при температуре предварительной деформации T_1 равна $\rho_\infty (T_1) = \rho_0 \approx [\varkappa_f / \varkappa_a (T_1)]^2$ [19], то

$$\psi_\infty = \varkappa_a (T_1) / \varkappa_a (T_2) < 1. \tag{15}$$

Из этого выражения видно, что аннигиляционное разупрочнение дислокационной структуры при температуре $T_2 > T_1$ обусловлено ростом коэффициента аннигиляции дислокаций при повышении температуры.

Список литературы

[1] Luft A., Richter J., Schlaubitz e. a. // Mater. Sci. Eng. 1975. V. 20. N 1. P. 113—122.
[2] Ritschel Ch., Luft A., Schulze D. // Krist. a. Techn. 1978. V. 13. N 7. P. 791—797.
[3] Brenner B., Luft A. // Mater. Sci. Eng. 1982. V. 52. N 3. P. 229—237.
[4] Бега Н. Д., Засимчук Е. Э., Каверина С. А., Фирстов С. А. // Металлофизика. 1980. Т. 2. № 1. С. 71—77.
[5] Засимчук Е. Э. // Кооперативные деформационные процессы и локализация деформации. Киев. 1989. С. 58—100.
[6] Гуревич М. Е., Дубовицкая Н. В., Захаров С. М., Лариков Л. Н. // ФММ. 1979. Т. 47. № 3. С. 659—662.
[7] Владимиров В. И., Кусов А. А. // ФММ. 1977. Т. 43. № 6. С. 1127—1132.
[8] Владимиров В. И., Кусов А. А. // ФММ. 1982. Т. 53. № 2. С. 367—371.
[9] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 175—180.
[10] Малыгин Г. А. // ФММ. 1990. Т. 68. № 5. С. 22—30.
[11] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 7. С. 43—48.
[12] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 4. С. 1102—1107.
[13] Louchet F., Kubin L. P. // Phys. St. Sol. (a). 1979. V. 56. P. 169—176.
[14] Носкова Н. И., Перетурина И. А., Журавлева А. И. и др. // ФММ. 1987. Т. 64. № 3. С. 554—560.
[15] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 7. С. 2067—2072.
[16] Neumann P. D. // Acta Met. 1971. V. 19. N 11. P. 1233—1241.

[17] Kuhlmann-Wilsdorf D., Laird C. // Mater. Sci. Eng. 1977. V. 27. N 1. P. 139—156.
[18] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 10. С. 3174—3177.
[19] Владимирова Г. В., Малыгин Г. А., Рывкина Д. Г. // ФММ. 1989. Т. 67. № 2. С. 380—388.
[20] Справочник по специальным функциям // Под ред. М. Абрамовица. М.: Наука, 1979. С. 401.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
2 апреля 1990 г.