

# Корреляционные эффекты в ансамбле краевых дислокаций

© Г.Ф. Сарафанов

Нижегородский филиал Института машиноведения им. А.А. Благонравова Российской академии наук,  
603024 Нижний Новгород, Россия

E-mail: sarafanov@sinn.ru

(Поступила в Редакцию 18 февраля 2008 г.)

Развита кинетическая теория корреляционного взаимодействия в ансамбле краевых дислокаций, связанная с эффектами их флуктуационной динамики. Сформулированы уравнения эволюции дислокационного ансамбля с учетом корреляционного взаимодействия дислокаций. Установлен критерий неустойчивости однородного распределения дислокаций. Показано, что зарождение пространственно неоднородных дислокационных структур, основанных на корреляционной неустойчивости, зависит в основном от особенностей упругого взаимодействия дислокаций и не критично к выбору механизмов их кинетики. В качестве приложения развита теория рассмотрена задача по определению дисперсии поля внутренних напряжений.

PACS: 61.72.Lk, 61.72.Bb

## 1. Введение

Известно, что механические свойства кристаллических металлов и сплавов существенным образом зависят от дефектной структуры материала [1–3]. Поэтому для понимания и описания механических свойств материала необходимо знание механизмов зарождения и эволюции дислокационных структур (ячеистой, полосовой, фрагментированной и т.д.). Было выяснено, что для формирования таких структур определяющими являются коллективные эффекты, которые проявляются в дислокационных неустойчивостях разного типа [4].

С точки зрения приложений, важнейшей неустойчивостью при эволюции дефектной структуры материала является ротационная неустойчивость [1,5], которая обнаруживается при достижении достаточной степени деформации практически в любом поликристаллическом материале и обусловлена тем, что кристаллы по-разному ориентированы относительно деформирующих напряжений. Результатом развития этой неустойчивости является фрагментация кристалла, т.е. образование субгранц деформационного происхождения и постепенное измельчение зеренной структуры материала. Установлено [1,6], что движущей силой процесса фрагментации являются пластические несовместности (мезодефекты дисклинационного типа), которые накапливаются на границах зерен и являются мощными источниками упругих напряжений. В этих упругих полях происходят кинетическое расслоение дислокационных зарядов и формирование разориентированных областей (оборванных субгранц) [6–9].

В монокристаллах изначально межкристаллические границы отсутствуют, поэтому процесс фрагментации протекает по более сложному сценарию. Сначала формируется неразориентированная ячеистая дислокационная структура, которая с ростом деформации трансформируется в разориентированную. В результате в границах ячеистой структуры возникают мезодефекты дисклинационного типа, являющиеся зародышами малоугловых границ, из которых постепенно формируются

фрагменты межзеренного типа. После этого возникают условия для развития ротационной неустойчивости.

Таким образом, важным моментом развития теоретических представлений о деформационном измельчении монокристаллов является построение теории возникновения ячеистых структур, а также теории формирования разориентированных фрагментов на фоне ячеистой структуры [1]. В настоящей работе рассматривается начальный аспект этой проблемы, связанный с особенностями возникновения слаборазориентированных ячеистых структур.

В последние годы накоплено достаточно данных, позволяющих трактовать процессы пластической деформации с точки зрения нелинейной динамики деформируемого кристалла [4,10,11]. Такое поведение обусловлено прежде всего упругим взаимодействием носителей пластичности — дислокаций и кинетическими особенностями их динамики. При кинетическом описании дислокационных структур являются результатом развития в дислокационном ансамбле неустойчивости однородного распределения дефектов. В последнее время различают два типа такой неустойчивости [4]. Во-первых, это разные варианты генерационно-рекомбинационной неустойчивости, реализуемой для некоторого класса модельных уравнений реакционно-диффузионного типа [10–12]. Во-вторых, это корреляционная неустойчивость [13–15], которая, с нашей точки зрения, более адекватна физической ситуации и поэтому будет подробно рассмотрена далее.

На начальных этапах деформирования при относительно однородном распределении дислокаций в силу равенства нулю их суммарного вектора Бюргерса средняя энергия упругого взаимодействия дислокаций равна нулю. Поправки к нулевому значению возникают при учете корреляции между положениями различных дислокаций. В [15] было показано, что корреляционная поправка к упругой энергии системы дислокаций отрицательна, поэтому возникает эффект притяжения дислокаций независимо от направления их вектора Бюргерса, что и обуславливает образование неоднородных дислокационных структур ячеистого типа [16,17]. В указанных

работах рассмотрение проводилось лишь для ансамбля винтовых дислокаций, и, кроме того, в ряде случаев использовался модельный подход. В настоящей работе исследование корреляционных эффектов проводится более систематическим образом, что позволит обобщить ранее полученные результаты, установить критерии расхождения однородного состояния в ансамбле краевых дислокаций, выявить новые эффекты.

## 2. Эволюционные уравнения динамики дислокаций при учете флуктуационных процессов

При последовательном анализе корреляционных эффектов возникает проблема строгого описания эволюции дислокационного ансамбля с учетом динамики флуктуаций плотности дислокаций, влияние которых проявляется на масштабах порядка среднего расстояния между дислокациями и связано с дискретным характером распределения дефектов.

При построении базовых уравнений самосогласованной динамики дислокационного ансамбля можно опираться на уравнение совместности, вытекающее из континуальных уравнений динамики кристалла с дислокациями и являющееся дифференциальной формой закона сохранения вектора Бюргерса в сплошной среде [18,19]. С другой стороны, закон сохранения вектора Бюргерса, будучи фундаментальным, выполняется на любом уровне описания и может служить основой для построения микроскопических уравнений эволюции ансамбля дислокаций.

В приближении сплошной среды система эволюционных уравнений динамики дислокаций является усредненной на масштабе  $l_f$ , выбираемом из условия  $\bar{r} < l_f < R_c$  (где  $\bar{r}$  — среднее расстояние между дислокациями,  $R_c$  — характерный размер кристаллов). Если масштаб флуктуаций порядка или превышает  $l_f$ , то необходим учет высших моментов. Для выяснения роли таких флуктуаций используем метод моментов в приближении вторых корреляционных функций [20]. Исследование проводим в двумерной постановке, полагая дислокационные линии прямолинейными.

При микроскопическом описании эволюцию дислокационного ансамбля можно описать тензорами микроскопической плотности дислокаций

$$\alpha_{ik}^{(m)} = \sum_{a,i} l_i b_k^a \delta_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ai}) = \sum_a l_i b_k^a \rho_a^{(m)} \quad (1)$$

и их потока

$$\begin{aligned} j_{ik}^{(m)} &= e_{ijn} \sum_{a,i} l_j b_k^a v_{n,a}^{(m)} \delta_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ai}) \\ &= e_{ijn} \sum_a l_j b_k^a v_{n,a}^{(m)} \rho_a^{(m)}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь величина  $\rho_a^{(m)} = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ai})$  имеет смысл микроскопической скалярной плотности дислокаций, индекс  $a$

различает дислокации по направлению их вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$  по отношению к  $\mathbf{l}$  ( $\mathbf{l}$  — единичный вектор, касательный к линии дислокации), а  $i$  нумерует дислокации. Тензоры  $\alpha_{ik}^{(m)}$  и  $j_{ik}^{(m)}$  удовлетворяют уравнению

$$\frac{\partial \alpha_{ik}^{(m)}}{\partial t} + e_{iln} \frac{\partial j_{nk}^{(m)}}{\partial x_l} = 0, \quad (3)$$

выражающему закон сохранения вектора Бюргерса системы дислокаций. Подставляя (1), (2) в уравнение (3), получаем эволюционные уравнения для микроскопической плотности дислокаций

$$\frac{\partial \rho_a^{(m)}}{\partial t} + \text{div} \rho_a^{(m)} \mathbf{v}_a^{(m)} = \Phi_a(\rho_a^{(m)}), \quad (4)$$

где нелинейные функции  $\Phi_a(\rho_a^{(m)})$  удовлетворяют условию  $\sum_a l_j b_k^a \Phi_a(\rho_a^{(m)}) = 0$ , отражающему факт сохранения вектора Бюргерса в ходе кинетических процессов. Выражение для микроскопической скорости  $\mathbf{v}_a^{(m)}$  дислокаций в приближении их квазивязкого скольжения можно представить в виде [17]:

$$\mathbf{v}_a^{(m)}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{V}_a + \hat{M}^a \mathbf{f}_a^{(m)}(\mathbf{r}, t), \quad (5)$$

$$\mathbf{f}_a^{(m)}(\mathbf{r}, t) = - \sum_c \int \rho_c^{(m)}(\mathbf{r}') \nabla W_{ac}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (6)$$

Здесь  $\mathbf{V}_a$  — постоянная составляющая скорости дислокаций, обусловленная напряжением течения  $\sigma_e$  в плоскости скольжения,  $\mathbf{f}_a^{(m)}$  — сила, действующая на единицу длины дислокации со стороны системы дислокационных зарядов,  $\hat{M}^a$  — тензор подвижности дислокаций,  $W_{ac}(\mathbf{r})$  — энергия упругого взаимодействия двух параллельных краевых дислокаций, характеризуемых векторами  $\mathbf{b}_a$  и  $\mathbf{b}_c$ , которая дается выражением [21]

$$W_{ac}(\mathbf{r}) = \frac{G([\mathbf{b}_a \times \mathbf{l}][\mathbf{b}_c \times \mathbf{l}])}{2\pi(1-\nu)} \ln \frac{R_c}{r} - \frac{G([\mathbf{b}_a \times \mathbf{l}]\mathbf{r})([\mathbf{b}_c \times \mathbf{l}]\mathbf{r})}{2\pi(1-\nu)r^2}, \quad (7)$$

где  $r$  — расстояние между дислокациями ( $\mathbf{r} \perp \mathbf{l}$ ),  $G$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона.

Представим  $\rho_a^{(m)}(\mathbf{r}, t)$  и  $\mathbf{v}_a^{(m)}(\mathbf{r}, t)$  в виде

$$\begin{aligned} \rho_a^{(m)}(\mathbf{r}, t) &= \rho_a(\mathbf{r}, t) + \delta\rho_a(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{v}_a^{(m)}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{v}_a(\mathbf{r}, t) + \delta\mathbf{v}_a(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (8)$$

где  $\mathbf{v}_a(\mathbf{r}, t)$ ,  $\rho_a(\mathbf{r}, t)$  и  $\delta\mathbf{v}_a(\mathbf{r}, t)$ ,  $\delta\rho_a(\mathbf{r}, t)$  — средние значения скорости и плотности дислокаций, фигурирующие в эволюционных уравнениях сплошной среды, и флуктуации этих величин соответственно.

Подставим разложение (8) в исходную систему микроскопических уравнений (4)–(6) и разделим масштабы. Тогда система уравнений для средних величин может

быть записана в виде

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \text{div}(\rho_a \mathbf{v}_a + \langle \delta \rho_a \delta \mathbf{v}_a \rangle) = \Phi_a(\rho_a), \quad (9)$$

$$\mathbf{v}_a(\mathbf{r}, t) = \mathbf{V}_a - \hat{M}^a \sum_c \int \rho_c(\mathbf{r}') \frac{\partial W_{ac}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{r}', \quad (10)$$

где величина  $\langle \delta \rho_a \delta \mathbf{v}_a \rangle = \mathbf{J}_a^{\text{corr}}$  имеет смысл корреляционного потока дислокаций, а в нелинейных функциях  $\Phi_a(\rho_a)$  пренебрегается флуктуациями плотности, поскольку нас интересуют корреляционные эффекты, связанные с упругим взаимодействием дислокаций.

Уравнения для флуктуаций представим в линеаризованном виде

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_a \nabla \right) \delta \rho_a + \rho_a \delta \mathbf{v}_a = -\frac{1}{2\tau} \sum_a \delta \rho_a, \quad (11)$$

$$\delta \mathbf{v}_a(\mathbf{r}) = -\hat{M}^a \sum_c \int \delta \rho_c(\mathbf{r}') \frac{\partial W_{ac}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{r}' \quad (12)$$

ввиду предполагаемой малости флуктуаций. Вид правой части в (11) определяется условием  $\sum_a b_a \Phi_a = 0$ , отражающим факт сохранения вектора Бюргера при различных дислокационных реакциях и размножении.

С учетом (12) выражение для корреляционного потока принимает вид

$$\mathbf{J}_a^{\text{corr}}(\mathbf{r}, t) = -\hat{M}^a \times \sum_c \int \langle \delta \rho_a(\mathbf{r}, t) \delta \rho_c(\mathbf{r}', t) \rangle \frac{\partial W_{ac}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{r}', \quad (13)$$

в котором коррелятор флуктуаций плотности дислокаций можно записать в виде [20]

$$\langle \delta \rho_a(\mathbf{r}, t) \delta \rho_c(\mathbf{r}', t) \rangle = \rho_a(\mathbf{r}, t) \rho_c(\mathbf{r}', t) g_{ac}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \delta_{ac} \rho_a(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (14)$$

Здесь  $g_{ac}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  — двухчастичная корреляционная функция, требующая определения. Второе слагаемое в правой части (14) возникает благодаря тому, что корреляционная функция характеризует статистическую связь разных частиц. Вклад от этого слагаемого в (13) равен нулю ввиду равенства нулю суммарного вектора Бюргера системы дислокаций.

Далее полагаем, что характерный пространственный масштаб изменения  $\rho_a(\mathbf{r}, t)$  существенно превышает масштаб изменения флуктуаций  $\delta \rho_a(\mathbf{r}, t)$ ; тогда в корреляторе (14) существенно зависимость лишь от разности координат, и соответственно  $g_{ac}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_{ac}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ . Применяя подход, используемый в [17,20], и предполагая, что краевые дислокации движутся в параллельных плоскостях скольжения в направлении оси  $0x$  (единичный вектор  $\mathbf{l}$  направлен по оси  $0z$ ,  $\mathbf{b}_a = \pm b \mathbf{e}_x$ ), находим из системы уравнений (11), (12) выражение

для пространственной Фурье-компоненты двухчастичной корреляционной функции

$$g_{ac}(\mathbf{k}) = -\frac{4\pi D b_a b_c k_y^2}{T_{\text{ext}}(\mathbf{k}^4 + 4k_y^2 r_d^{-2})}, \quad (15)$$

где параметр  $r_d$  дается выражением  $r_d^{-2} = \pi D b^2 \rho_0 / T_{\text{ext}}$  и имеет смысл радиуса экранирования упругого поля дислокаций [7,15];  $T_{\text{ext}} = b \sigma_e \bar{L}$  представляет собой работу деформации в системе скольжения,  $\bar{L}$  — длина свободного пробега дислокаций,  $D = G/2\pi(1 - \nu)$ .

Переходя в (15) к координатному представлению, окончательно получаем

$$g_{ac}(\mathbf{r}) = -\frac{D b_a b_c r_d}{T_{\text{ext}}} \frac{\partial}{\partial y} (\text{sh}(y/r_d) K_0(r/r_d)), \quad (16)$$

где  $K_0(r/r_d)$  — функция Макдональда нулевого порядка.

С учетом (16) эволюционные уравнения для ансамбля краевых дислокаций можно представить в следующей итоговой форме:

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{J}_a + \mathbf{J}_a^{\text{corr}}) = \Phi_a(\rho_a), \quad (17)$$

$$\mathbf{J}_a(\mathbf{r}, t) = \rho_a(\mathbf{r}, t) \mathbf{V}_a - \rho_a(\mathbf{r}, t) \hat{M}_a b_a \nabla \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial y}, \quad (18)$$

$$\Delta^2 \psi(\mathbf{r}, t) = -4\pi D \sum_a b_a \frac{\partial \rho_a(\mathbf{r}, t)}{\partial y}, \quad (19)$$

$$\mathbf{J}_a^{\text{corr}}(\mathbf{r}) = -\hat{M} \rho_a(\mathbf{r}) \times \sum_c \int \rho_c(\mathbf{r}') g_{ac}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \frac{\partial W_{ac}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{r}'. \quad (20)$$

Здесь  $\psi(\mathbf{r}, t)$  — функция напряжений Эйри системы краевых дислокаций.

### 3. Корреляционная неустойчивость

Как отмечалось выше, корреляционное взаимодействие дислокаций приводит их к эффективному притяжению. Это в свою очередь должно порождать расслоение однородного распределения дислокаций и поляризацию дислокационной структуры. Обоснование этого положения проведем, установив критерий неустойчивости однородного состояния в рамках полученной системы уравнений (16)–(20). Критерий неустойчивости находим, используя первый метод Ляпунова [22], основанный на линеаризации исходных нелинейных уравнений.

Введем переменные  $\rho = \rho^+ + \rho^-$  и  $I = \rho^+ - \rho^-$ , определяющие соответственно суммарную плотность дислокаций и избыточную (дислокационный заряд). В этих переменных система эволюционных уравнений (16)–(20) принимает вид

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \mathbf{V} I(\mathbf{r}, t) - \hat{M} \rho(\mathbf{r}, t) \int \rho(\mathbf{r}', t) \mathbf{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) = \Phi(\rho, I), \quad (21)$$

$$\frac{\partial I(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \left( V\rho(\mathbf{r}, t) - \hat{M}b\rho(\mathbf{r}, t)\nabla \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial y} \right) = 0, \quad (22)$$

$$\Delta^2 \psi(\mathbf{r}, t) = -4\pi Db \frac{\partial I(\mathbf{r}, t)}{\partial y}. \quad (23)$$

Здесь функция  $\mathbf{G}(\mathbf{r}) = g_{ac}(r)\nabla W_{ac}(r)$  может быть найдена через ее Фурье-образ  $\mathbf{G}_k$ , который, как нетрудно показать, удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial G_{k_x}}{\partial k_x} + \frac{\partial G_{k_y}}{\partial k_y} = -i(Db^2/\rho_0) \frac{4k_y^2 r_d^{-2}}{k^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}}. \quad (24)$$

Из вида уравнения (24) следует, что одномодовые периодические решения с  $k_y = 0$  не могут быть реализованы в рассматриваемой системе краевых дислокаций. Должна быть хотя бы небольшая неоднородность по  $y$ . В реальности формирование неоднородных периодических структур ячеистого типа наблюдается в условиях протекания турбулентного (множественного) скольжения дислокаций, что естественным образом и вызывает неоднородность в их распределении. Причем неоднородность зачастую является изотропной, т.е. характерные пространственные масштабы изменения плотности дислокаций по  $x$  и по  $y$  примерно равны ( $L_x \sim L_y$ ).

В этом приближении для системы дислокаций  $k_x \sim k_y$ , тогда  $k^4 = k^2(k_x^2 + k_y^2) \sim 2k^2 k_y^2$  и выражение (24) упрощается:

$$\frac{1}{k} \frac{\partial(kG_k)}{\partial k} + \frac{1}{k} \frac{\partial G_\varphi}{\partial \varphi} = -\frac{i(Db^2/\rho_0)}{1 + k^2 r_d^{-2}/2}. \quad (25)$$

При этом оно имеет решение

$$\mathbf{G}_k = -i\mathbf{k}G_m = -i\mathbf{k} \frac{Db^2}{\rho_0 k^2 r_d^2} \ln(1 + k^2 r_d^2/2). \quad (26)$$

С помощью этого решения уравнение (21) преобразуется к виду

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + V \frac{\partial I(\mathbf{r}, t)}{\partial x} - \nabla \left[ \rho(\mathbf{r}, t) \hat{M} \nabla \int \rho(\mathbf{r}', t) G_m(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right] = \Phi(\rho, I), \quad (27)$$

где функция Грина  $G_m(\mathbf{r})$  может быть представлена в виде разложения

$$G_m(\mathbf{r}) = \frac{Db^2}{2\rho_0 r_d^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (r_d^2 \Delta/2)^{n-1} \delta(\mathbf{r}) \simeq \frac{Db^2}{2\rho_0 r_d^2} (1 + (r_d^2/4)\Delta + \dots) \delta(\mathbf{r}). \quad (28)$$

Заметим, что учет первых двух членов в разложении (28) сводит задачу к обсуждавшимся ранее моделям [4,14,15] с потоком вида  $\mathbf{J} \sim A_1 \nabla \rho + A_2 \nabla^3 \rho$ , имеющим форму известного в теории расслоения фаз потока

Кана-Хильярда. Важно, однако, получить результаты в более общей постановке и соответственно выяснить корректность такого приближения.

Определим устойчивость однородного распределения дефектов. Линеаризуя систему уравнений (27), (22) и (23), для Фурье-гармоник компонент системы ( $\sim \exp\{\lambda t - i\mathbf{k}\mathbf{r}\}$ ) находим

$$\lambda \rho_k - ik_x V I_k - Mk_x^2 Db^2 \frac{\ln(1 + k^2 r_d^2/2)}{k^2 r_d^2} \rho_k + \frac{\rho_k}{\tau} = 0, \quad (29)$$

$$\lambda I_k - ik_x V \rho_k - ik_x^2 k_y M b \rho_0 \psi_k = 0, \quad (30)$$

$$k^4 \psi_k - ik_y 4\pi Db I_k = 0, \quad (31)$$

откуда получаем характеристическое уравнение

$$\lambda \tau + \frac{k_x^2 \bar{L}^2}{\lambda \tau + 4k_x^2 k_y^2 \bar{L}^2/k^4 r_d^2} - \frac{\eta k_x^2}{\pi k^2} \ln(1 + k^2 r_d^2/2) + 1 = 0, \quad (32)$$

где  $\eta = \bar{L}^2/\rho_0 r_d^4$  — введенный нами управляющий параметр,  $\tau$  — время релаксации ансамбля дислокаций к однородному состоянию  $\rho_0$ ,  $\bar{L} = \tau V$  — длина релаксации, имеющая смысл длины свободного пробега дислокаций,  $M$  — подвижность дислокаций в плоскости их скольжения.

Из характеристического уравнения (32) в приближении равносности возникающих структур ( $k_x \sim k_y$ ) определяем условие неустойчивости ( $\text{Re}\{\lambda\} \gtrsim 0$ ,  $\text{Im}\{\lambda\} = 0$ ) однородного состояния:

$$L(k^2) = 1 + \frac{k^2 r_d^2}{2} - \frac{\eta}{2\pi} \ln(1 + k^2 r_d^2/2) < 0. \quad (33)$$

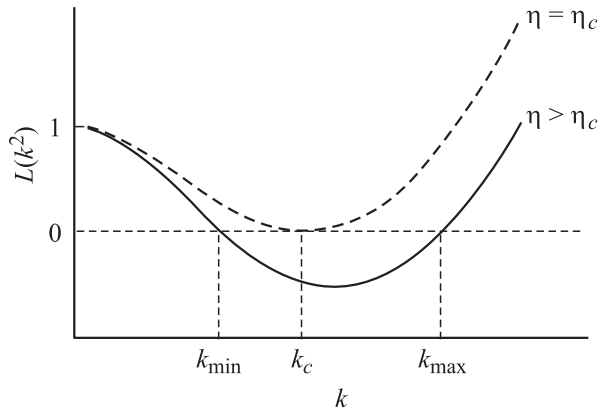
Отсюда непосредственно следует, что при непрерывном увеличении параметра  $\eta$  неустойчивость возникает в точке  $\eta = \eta_c = 2\pi e$  при значении волнового вектора  $|\mathbf{k}| = k_c = \sqrt{2(e-1)}/r_d$ . Как следует из неравенства (33), неустойчивость имеет пороговый характер и реализуется при  $\eta > \eta_c$  в интервале волновых чисел  $|\mathbf{k}| \in (k_{\min}, k_{\max})$ . Диаграмма, иллюстрирующая возникновение корреляционной неустойчивости, показана на рисунке.

Таким образом, критерием неустойчивости однородного распределения в ансамбле краевых дислокаций является выполнение условия  $\eta = \bar{L}^2/\rho_0 r_d^4 = \pi^2 D^2 b^2 \rho_0 / \sigma_e^2 > n_c = 2\pi e$  или

$$\rho_0 > \rho_c = \frac{8\pi e(1-\nu)^2}{b^2} \left( \frac{\sigma_e}{G} \right)^2. \quad (34)$$

Подчеркнем, что рассмотренная неустойчивость обусловлена исключительно корреляционным (флуктуационным) взаимодействием дислокаций и поэтому является чисто корреляционным эффектом.

При типичных значениях параметров системы ( $b = 3 \cdot 10^{-8}$  см,  $\sigma_e/G = 3 \cdot 10^{-4}$ ,  $\nu = 1/3$ ) критической плотности дислокаций соответствует величина  $\rho_c \simeq 3 \cdot 10^9$  см $^{-2}$ . Критерий (34), несмотря на свою



Диаграмма, иллюстрирующая возникновение неустойчивости однородного состояния в ансамбле краевых дислокаций. В момент неустойчивости ( $\eta = \eta_c$ ) нарастают флуктуации плотности дислокаций с волновым вектором  $k = k_c = \sqrt{2(e-1)}/r_d$ .

достаточно простую форму, содержит две величины (плотность дислокаций и напряжение течения), которые зависят от совокупности других параметров деформируемого кристалла и поэтому могут отражать многообразие деформационных процессов.

Важным моментом развития теории является установление характерного размера возникающей ячеистой структуры. Экспериментально установлено [23,24], что внешнее напряжение  $\sigma$  связано со средним размером ячеек  $d$  обратной пропорциональной зависимостью  $\sigma = \sigma_0 + K_0/d$ , где  $K_0$  — некоторая постоянная,  $\sigma_0$  — напряжение, учитывающее различные механизмы упрочнения. Кроме того, установлено, что размер ячеистой структуры  $d$  и плотность дислокаций  $\rho$  связаны соотношением  $d = C \cdot \rho^{-1/2}$ , где  $C = 2-16$  — константа [25]. Заметим, что из этих двух соотношений получается универсальная зависимость  $\sigma \sim \sqrt{\rho}$ , часто принимаемая при различных оценках как априорный момент теории. Поэтому независимым оказывается лишь соотношение  $d \sim \rho^{-1/2}$ .

Из результатов работы следует, что нарастание флуктуаций плотности дислокаций, приводящее к возникновению неоднородных структур, происходит с характерным пространственным масштабом  $L_c = 2\pi/k_c = 2\pi r_d/\sqrt{2(e-1)}$ . Связывая параметр  $r_d$  с плотностью дислокаций  $\rho_0$ , получаем

$$L_c = \sqrt{8\pi^2/e(e-1)}\rho_0^{-1/2} \simeq 4.1\rho_0^{-1/2}. \quad (35)$$

Заметим, что проводимый анализ относится к случаю, когда все дислокации считаются подвижными. При активной деформации всегда происходит накопление дислокаций, связанное с переходом части подвижных дислокаций  $\rho_0$  в неподвижные, с образованием соответствующей субструктуры. При учете этого обстоятельства период  $L_c$  несколько увеличивается.

Как указывалось выше, корреляционный поток дислокаций в работах различных авторов задавался в форме

потока Кана–Хильярда, соответствующего в рамках настоящего исследования первым двум членам разложения (28). Из выражения (26) нетрудно установить степень корректности такого приближения. В окрестности неустойчивости ( $\eta \sim \eta_c$ ,  $k \simeq k_c$ ) указанное приближение справедливо, если  $\ln(1 + k_c^2 r_d^2/2) \simeq k_c^2 r_d^2/2 - k_c^4 r_d^4/8$ , что, очевидно, имеет место при  $k_c^2 r_d^2/2 < 1$ . С другой стороны, из проведенного выше линейного анализа исходной системы (16)–(20) следует, что  $k_c^2 r_d^2/2 = e - 1 \simeq 1.718$ . Таким образом, задание корреляционного потока в форме потока Кана–Хильярда можно использовать лишь для получения качественных результатов.

Рассмотрим теперь вопрос, связанный с некоторым упрощением исходной системы уравнений (16)–(20). Заметим, что при выводе условий неустойчивости (32) можно было бы пренебречь малым инкрементом  $\lambda$  в знаменателе второго слагаемого. Фактически это означает, что с самого начала можно было бы пренебречь производной по времени в уравнении (22). Это приближение связано с интенсивной релаксацией дислокационных зарядов (см. [18]), в рамках его систему можно также линеаризовать по  $I$ . Учитывая, кроме того, приближение  $k^4 \sim 2k^2 k_y^2$  (приближение равноосных ячеек) и соответственно  $\nabla^4 \sim 2\nabla^2(\partial^2/\partial y^2)$ , из уравнений (22) и (23) можно установить связь

$$\frac{\partial}{\partial x} I(\mathbf{r}, t) = -\frac{r_d^2}{2L} \nabla^2 \rho(\mathbf{r}, t). \quad (36)$$

Тогда с учетом (36) уравнение (27) для суммарной плотности  $\rho(\mathbf{r}, t)$  можно записать в виде

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{r_d^2}{2\tau} \Delta \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \left[ \rho(\mathbf{r}, t) \hat{M} \nabla \int \rho(\mathbf{r}', t) G_m(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right] = \Phi(\rho), \quad (37)$$

где время релаксации  $\tau$  дислокационной системы к однородному состоянию  $\rho_0$  определяется из вида правой части уравнения ( $\tau^{-1} = \partial \Phi(\rho_0)/\partial \rho$ ,  $\Phi(\rho_0) = 0$ ), а функция Грина  $G_m(\mathbf{r})$  — согласно (28).

Нахождение нелинейных решений уравнения (37) (а также более точной системы (16)–(20)) в виде ячеистых структур различной геометрии выходит за рамки настоящей работы и будет проведено в дальнейшем.

#### 4. Флуктуационное поле внутренних напряжений

Неоднородность распределения дислокаций неизбежно приводит к неоднородности распределения поля внутренних напряжений. Это в свою очередь может оказать существенное влияние на движение и иммобилизацию дислокаций, на взаимодействие дислокаций с точечными дефектами, примесями и т.д. В связи с этим естественно поставить задачу о нахождении статистических характеристик распределения полей напряжений при случайном распределении дислокаций.

Флуктуации дислокационной плотности  $\delta\rho_a(\mathbf{r})$  вызывают изменение компоненты тензора внутренних напряжений  $\sigma_{xy}(\mathbf{r})$  на величину

$$\begin{aligned}\delta\sigma_{xy}(\mathbf{r}) &= \sum_a \int \delta\rho_a(\mathbf{r}') \sigma_{xy}^{(a)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ &= - \int \delta I(\mathbf{r}') \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x \partial y} d\mathbf{r}',\end{aligned}\quad (38)$$

где  $\sigma_{xy}^{(a)} = -[\psi_a]''_{xy}$  — компонента тензора напряжений краевой дислокации,  $\psi_a(\mathbf{r}) = Db_{ay} \ln(R_c/r)$  — ее функция напряжений Эйри [21],  $\delta I = \delta\rho_+ - \delta\rho_0$  — флуктуация избыточной плотности дислокаций,  $\psi = b\psi_a/b_a$ .

Тогда дисперсию для поля внутренних напряжений можно записать в виде

$$\langle \delta\sigma_{xy}^2 \rangle = \iint \langle \delta I(\mathbf{r}') \delta I(\mathbf{r}'') \rangle \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x \partial y} \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')}{\partial x \partial y} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}''.\quad (39)$$

Используя представление Фурье и то обстоятельство, что коррелятор избыточной плотности зависит лишь от разности координат, преобразуем интегральную свертку (39) к виду

$$\langle \delta\sigma_{xy}^2 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint k_x^2 k_y^2 \langle \delta I \delta I \rangle_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^2 d\mathbf{k},\quad (40)$$

где

$$\psi_{\mathbf{k}} = i4\pi Db \frac{k_y}{|\mathbf{k}^4|}, \quad \langle \delta I \delta I \rangle_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}^4 \rho_0^2}{\mathbf{k}^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}}\quad (41)$$

— соответственно Фурье-образ функции напряжений Эйри краевой дислокации и выражение для пространственной спектральной плотности дислокационного заряда, полученное из системы уравнений динамики флуктуаций (11), (12).

Интегрируя (40) с учетом (41), окончательно получаем

$$\begin{aligned}\langle \delta\sigma_{xy}^2 \rangle &= 4D^2 b^2 \rho_0 \iint \frac{k_x^2 k_y^2}{(\mathbf{k}^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}) \mathbf{k}^4} d\mathbf{k} = 4D^2 b^2 \rho_0 \\ &\times \int_0^{k_{\max}} k dk \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2 \varphi \sin^4 \varphi}{k^2 + 4r_d^{-2} \sin^2 \varphi} d\varphi \simeq \frac{G^2 b^2 \rho_0}{8\pi(1-\nu)^2} \ln \frac{r_d}{b},\end{aligned}\quad (42)$$

где  $k_{\max} \sim 1/b$ . Если не учитывать эффекты, связанные с корреляционным взаимодействием, то в интегралах (42) следовало бы принять  $r_d^{-2} = 0$  и тогда для нижнего предела интегрирования необходимо было бы ввести радиус обрезания  $k_{\min} \sim 1/R_c$ . В этом случае в конечной формуле (42) вместо внутреннего радиуса экранирования  $r_d$  фигурировал бы внешний радиус экранирования  $R_c$ , что соответствовало бы полученной ранее формуле Струнина [26].

Флуктуации полей внутренних напряжений представляют собой атермические барьеры на пути движения дислокаций и вызывают упрочнение вида

$$\sigma_i = \sqrt{\langle \sigma_{xy}^2 \rangle} = \alpha_{\text{fl}} G b \sqrt{\rho},\quad (43)$$

где  $\alpha_{\text{fl}} = \sqrt{\ln(r_d/b)/8\pi(1-\nu)^2}$  — коэффициент флуктуационного трения. При типичных значениях  $r_d/b \sim 10^3$  и  $\nu = 1/3$  имеем  $\alpha_{\text{fl}} = 0.749$ , что оказывается близким к значению  $\alpha_{\text{fl}}$  для механизма упрочнения, вызванного, например, дислокациями „леса“ [2].

## 5. Заключение

Итак, отметим результаты, полученные при учете флуктуационных процессов в динамике дислокаций.

1) Корреляционное взаимодействие в ансамбле дислокаций вызывает развитие неустойчивости их однородного распределения. Критерием неустойчивости является достижение критической плотности дислокаций  $\rho_c = 8\pi e(1-\nu)^2 (\sigma_e/Gb)^2$ , пропорциональной квадрату напряжения течения кристалла  $\sigma_e$ . При превышении этой плотности происходят расслоение однородного распределения дислокаций и зарождение ячеистой структуры с характерным размером  $L_c = \sqrt{8\pi/e(e-1)} \rho^{-1/2}$ .

2) Особенностью рассматриваемой теоретической модели зарождения пространственно неоднородных структур ячеистого типа является то, что, во-первых, она вытекает из первых принципов и, во-вторых, является не критической к выбору механизмов кинетики дислокаций. Возникающие в результате развития корреляционной неустойчивости диссипативные дислокационные структуры в качественном отношении зависят лишь от особенностей упругого взаимодействия дислокаций.

3) Флуктуации плотности дислокаций приводят к статистически случайным неоднородностям в распределении поля внутренних напряжений. При учете корреляционного взаимодействия в ансамбле дислокаций выражение для дисперсии поля внутренних напряжений, действующего в системе скольжения дислокаций, определяется выражением  $\langle \sigma_{xy}^2 \rangle = [G^2 b^2 \rho_0 / 8\pi(1-\nu)^2] \ln(r_d/b)$ , которое отличается от полученного ранее выражения [26] тем, что в нем вместо внешнего радиуса экранирования  $R_c$  фигурирует внутренний —  $r_d$ .

## Список литературы

- [1] В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. Металлургия, М. (1986). 224 с.
- [2] В.И. Трефилов, В.Ф. Моисеев, Э.П. Печковский. Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических материалов. Наук. думка, Киев (1987). 245 с.
- [3] Б.И. Смирнов. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Наука, Л. (1981). 275 с.
- [4] Г.А. Малыгин. УФН **169**, 979 (1999).
- [5] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклиниция в кристаллах. Наука, Л. (1986). 224 с.

- [6] В.В. Рыбин. *Вопр. материаловедения* **29**, 11 (2002).
- [7] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. *ФТТ* **49**, 1780 (2007).
- [8] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. *Письма в ЖТФ* **33**, 87 (2007).
- [9] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. *Вопр. материаловедения* **49**, 5 (2007).
- [10] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **37**, 3 (1995).
- [11] L.P. Kubin. *Mater. Sci. Technol.* **6**, 137 (1993).
- [12] D. Walgraef, E.C. Aifantis. *J. Appl. Phys.* **58**, 668 (1985).
- [13] D.L. Holt. *J. Appl. Phys.* **41**, 3197 (1970).
- [14] Ш.Х. Ханнанов. *ФММ* **78**, 31 (1994).
- [15] Г.Ф. Сарафанов. *ФТТ* **39**, 1575 (1997).
- [16] Г.Ф. Сарафанов. *ФТТ* **43**, 1041 (2001).
- [17] Г.Ф. Сарафанов. *Кристаллография* **49**, 905 (2004).
- [18] Г.Ф. Сарафанов, И.Л. Максимов. *ФТТ* **39**, 1066 (1997).
- [19] А.М. Косевич. *Физическая механика реальных кристаллов*. Наук. думка. Киев (1981). 328 с.
- [20] Ю.Л. Климонтович. *Статистическая физика*. Наука, М. (1982). 608 с.
- [21] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972). 599 с.
- [22] Г. Николис, И. Пригожин. *Самоорганизация в неравновесных системах*. Мир, М. (1979), 512 с.
- [23] Р. Хоникомб. *Пластическая деформация металлов*. Мир, М. (1972). 408 с.
- [24] M.R. Staker, D.L. Holt. *Acta Metall.* **20**, 569 (1972).
- [25] Э.В. Козлов. *Вопр. материаловедения* **29**, 50 (2002).
- [26] Б.М. Струнин. *ФТТ* **9**, 805 (1967).