

УДК 539.4.01.015

КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ РАЗОРИЕНТИРОВАННЫХ ЯЧЕЙСТЫХ ДИСЛОКАЦИОННЫХ СТРУКТУР

Г. А. Малыгин

Сформулированы уравнения эволюции для плотностей дислокаций разного знака в пластически деформируемом кристалле в случае, когда скорости их размножения вследствие изгиба кристалла неодинаковы. При решении уравнений найдено, что равенство скоростей размножения приводит к формированию в кристалле периодической дислокационной структуры с границами ячеек, содержащими преимущественно положительные или отрицательные дислокации. Получены теоретические оценки разориентаций и поворотов решетки в такой поляризованной относительно знака дислокаций ячейистой дислокационной структуре.

Электронно-микроскопические наблюдения и дифракционный анализ показывают, что в образующейся в процессе пластической деформации кристалла ячейистой дислокационной структуре решетка между соседними ячейками разориентирована. При умеренных деформациях, соответствующих третьему участку кривых деформационного упрочнения, средний угол разориентации имеет величину порядка 1° , а при последующих больших пластических деформациях достигает нескольких градусов и может составлять десятки градусов на поздних стадиях деформации [1, 2]. Наличие разориентации решетки между соседними ячейками указывает, что их границы содержат избыточную плотность дислокаций того или иного знака. Из результатов дифракционного анализа следует, что границы, содержащие преимущественно положительные и отрицательные дислокации, закономерно чередуются, образуя характерную дипольную структуру [1-5].

Возникновение в кристалле областей с избыточной плотностью дислокаций одного знака свидетельствует, что в ходе пластической деформации на каком-то ее этапе дислокационная структура в кристалле теряет устойчивость по отношению к механическому знаку дислокаций: в структуре развивается процесс пространственной поляризации разноименных дислокаций. Установление микроскопического механизма этой поляризации и связанных с ней локальных поворотов и изгибов решетки — одна из актуальных задач физики пластичности кристаллов.

Согласно континуальной теории дефектов трансляционного типа, какими являются дислокации, изгиб решетки наступает в результате стеснения поворотов кристалла или части его объема, вызванных перемещением в них дефектов трансляционного типа [6, 7]. Реакцией на этот заторможенный сдвиг является возникновение в кристалле интегральных по отношению к дислокациям структурных дефектов поворотного типа (дисклинаций и дисклинационных диполей). Силовой и энергетический аспекты их образования в деформированных кристаллах рассмотрены в [1, 8].

Очевидно, что в рамках чисто континуального или чисто силового и энергетического подходов конкретный механизм возникновения в деформируемом кристалле дефектов такого типа и связанных с ними локальных

поворотов решетки не может быть до конца выяснен [9]. Для этого требуется микроскопический, кинетический подход к явлению, учитывающий реальную структуру кристалла и кинетические свойства дислокаций. Применение этого подхода к проблеме формирования в кристалле разориентированной ячеистой дислокационной структуры и является целью настоящей работы.

1. Кинетические уравнения и их решение

В [10] сформулированы кинетические уравнения, описывающие образование в пластически деформируемом кристалле периодической (ячеистой) дислокационной структуры. При формулировке и решении уравнений предполагалось, что дислокационный ансамбль содержит равное количество положительных и отрицательных дислокаций с одним и тем же типом вектора Бюргерса. В настоящей работе будет рассмотрен ансамбль, в котором имеется избыточная плотность дислокаций одного знака в результате более высокой скорости их размножения и накопления по сравнению с дислокациями противоположного знака.

Поскольку избыточная плотность дислокаций есть результат неоднородного поворота $\varphi(x)$ и связанного с ним пластического изгиба кристалла, то $\rho_+ - \rho_- = b^{-1} \partial \varphi / \partial x$, где b — вектор Бюргерса. Полагая $\varphi = \gamma$, получаем $\rho_+ - \rho_- = b^{-1} \partial \gamma / \partial x \approx \gamma / bL$, где γ — величина пластической деформации, L — эффективная длина пробега дислокаций, определяющая скорость накопления избыточной плотности дислокаций [5]

$$\frac{d(\rho_+ - \rho_-)}{d\gamma} = 1/bL = \frac{1}{b} (1/L_+ - 1/L_-). \quad (1)$$

Здесь L_+ , L_- — эффективные длины пробега дислокаций противоположных знаков при их размножении и иммобилизации на препятствиях недислокационной природы в неоднородном поле напряжений, связанном с внешним локальным или макроскопическим изгибом кристалла. В отсутствие изгиба $L_+ = L_-$ и $d(\rho_+ - \rho_-)/d\gamma = 0$.

Принимая во внимание сказанное и результаты [10], уравнения эволюции для плотностей ρ_+ и ρ_- запишем в виде

$$\rho_+ \frac{\partial \rho_+}{\partial \gamma} + (\xi - 1) \frac{\lambda_+^{\frac{1}{2}}}{b} \frac{\partial^2 \rho_+}{\partial x^2} = \left[(z_m - z_0)_+ + \frac{1}{2} z_f \rho_+^{1/2} + \frac{1}{2} z_f \rho_-^{1/2} - z_a \rho_- \right] \rho_+, \quad (2a)$$

$$\rho_- \frac{\partial \rho_-}{\partial \gamma} + (\xi - 1) \frac{\lambda_-^{\frac{1}{2}}}{b} \frac{\partial^2 \rho_-}{\partial x^2} = \left[(z_m - z_0)_- + \frac{1}{2} z_f \rho_+^{1/2} + \frac{1}{2} z_f \rho_-^{1/2} - z_a \rho_+ \right] \rho_-, \quad (2б)$$

z_m , z_0 — коэффициенты размножения и иммобилизации дислокаций на препятствиях недислокационной природы (скопления примесных атомов, выделения, границы зерен и т. д.); $(z_m - z_0)_{\pm} = (bL_{\pm})^{-1}$ — эффективные скорости накопления разноименных дислокаций; z_f — коэффициент размножения дислокаций на дислокациях леса (вторая система скольжения; см. [10]); z_a — коэффициент аннигиляции дислокаций; $\lambda_{\pm}^{\frac{1}{2}}$ — диффузионные длины;¹ ξ — коэффициент размножения диффузионного потока [11].

Стационарное $\partial \rho / \partial \gamma = 0$ решение уравнений (2) в случае $\rho_{\pm} = \rho$, $(z_m - z_0)_{\pm} = z_m - z_0$, $\lambda_{\pm}^{\frac{1}{2}} = \lambda_D$ получено в [10]. При условиях

$$\xi > 1, \quad z_0 > z_m, \quad 0 < \eta < \frac{24}{25}, \quad \eta = 4z_a(z_0 - z_m)/z_f^2 \quad (3)$$

¹ Диффузия дислокаций связана с процессом двойного поперечного скольжения винтовых дислокаций на препятствиях недислокационной природы [11], поэтому в общем случае при наличии изгиба $\lambda_{\pm}^{\frac{1}{2}} \neq \lambda_D$, $D_+ \neq D_-$, где D — коэффициент диффузии дислокаций.

оно имеет вид

$$\rho(x) = 1/\left[A - B \cos 2\pi \frac{x}{\Lambda}\right]^2, \quad \Lambda = [(\xi - 1) \lambda_D/b (x_0 - x_m)]^{1/2} \quad (4)$$

и описывает периодическую дислокационную структуру с размером ячеек Λ . Постоянные A и B зависят от коэффициентов уравнения (2).

Стационарное решение системы (2) в случае $\rho_+ \neq \rho_-$ и условиях (3) будем искать в аналогичном (4) виде

$$\rho_{\pm}(x) = 1/\left[A_{\pm} - B_{\pm} \cos 2\pi \frac{x}{\Lambda_{\pm}}\right]^2 = 1/Q_{\pm}^2(x), \quad (5)$$

где для краткости выражение в квадратных скобках обозначено буквой Q , а знаки « \pm » у параметров относятся соответственно к плотностям ρ_+ и ρ_- . Подставляя (5) в (2) и принимая во внимание, что $\cos 2\pi (x/\Lambda_{\pm}) = (A_{\pm} - Q_{\pm})/B_{\pm}$, получаем уравнения для определения неизвестных величин A_{\pm} , B_{\pm} , Λ_{\pm}

$$\begin{aligned} 2(\xi - 1) \frac{\lambda_D^+}{b} \left(\frac{2\pi}{\Lambda_+}\right)^2 \left[3 \frac{B_+^2 - A_+^2}{Q_+^2} + \frac{5A_+}{Q_+} - 2 \right] = \\ = -(x_0 - x_m) + \frac{x_f}{2Q_+} + \frac{x_f}{2Q_-} - \frac{x_a}{Q_-^2}, \end{aligned} \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} 2(\xi - 1) \frac{\lambda_D^-}{b} \left(\frac{2\pi}{\Lambda_-}\right)^2 \left[3 \frac{B_-^2 - A_-^2}{Q_-^2} + \frac{5A_-}{Q_-} - 2 \right] = \\ = -(x_0 - x_m) - \frac{x_f}{2Q_+} + \frac{x_f}{2Q_-} - \frac{x_a}{Q_-^2}. \end{aligned} \quad (6b)$$

Исключая из (6a) и (6b) Q_{\pm} , находим $A_{\pm} = 2x_f/5 (x_0 - x_m)_{\pm}$,

$$\Lambda_{\pm} = 4\pi \left[\frac{(\xi - 1) \lambda_D^{\pm}}{b (x_0 - x_m)_{\pm}} \right]^{1/2}, \quad B_{\pm} = \left(1 - \frac{25}{24} \eta_{\pm} \right)^{1/2} A_{\pm}, \quad \eta_{\pm} = \frac{4x_a}{x_f^2} (x_0 - x_m)_{\pm}. \quad (7)$$

2. Поляризованная дислокационная структура

Решения (5) для стационарных распределений дислокаций разных знаков $\rho_+(x)$ и $\rho_-(x)$ показывают, что максимальные $\rho_{\max}^{\pm} = (A_{\pm} - B_{\pm})^{-2}$ и минимальные $\rho_{\min}^{\pm} = (A_{\pm} + B_{\pm})^{-2}$ значения их плотностей в ячейистой структуре

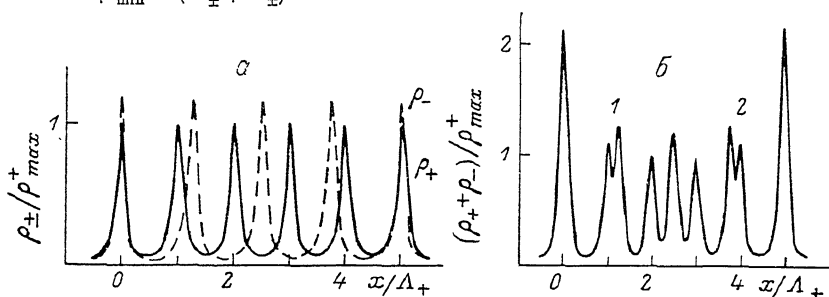


Рис. 1. Поляризованная ячейистая дислокационная структура (a) и соответствующее ей распределение скалярной плотности дислокаций $\rho_+ + \rho_-$ (б).

туре в общем случае не равны друг другу. Кроме того, из соотношений (7) следует, что распределения $\rho_+(x)$ и $\rho_-(x)$ имеют разные длины волн $\Lambda_+ \neq \Lambda_-$. Последнее обстоятельство означает, что границы ячеек ρ_+ не совпадают в пространстве с границами ячеек ρ_- , т. е. в кристалле имеются области с избыточной плотностью дислокаций того или иного знака.

Чтобы проиллюстрировать это графически, перепишем выражения (5) для $\rho_{\pm}(x)$ в виде

$$\rho_{\pm}(x) = \rho_{\max}^{\pm} \left[1 + (f_{\pm} - 1) \sin^2 \pi \frac{x}{\Lambda_{\pm}} \right]^2, \quad f_{\pm} = (A_{\pm} + B_{\pm}) / (A_{\pm} - B_{\pm}) \quad (8)$$

и учтем, что при $(x_0 - x_m)_{+} = \beta (x_0 - x_m)_{-}$, согласно (7), $\eta_{-} = \eta_{+} / \beta$, $A_{-} = \beta A_{+}$, где коэффициент $\beta \neq 1$ характеризует относительное неравенство скоростей размножения дислокаций разных знаков.

На рис. 1, а в координатах $\rho_{\pm} / \rho_{\max}^{\pm} - x / \Lambda_{\pm}$ показаны распределения $\rho_{\pm}(x)$ в случае $\eta_{+} = 0.53$, $f_{+} = 5$, $\beta = (5/4)^2$, $f_{-} = 9.15$, $\rho_{\max}^{-} / \rho_{\max}^{+} = 1.17$, $\lambda_{\pm}^2 = \pm \lambda_{\mp}$ и $\Lambda_{-} = \delta \Lambda_{+}$, где $\delta = \beta^{1/2} = 5/4$ — коэффициент относительной разницы периодов рассматриваемых распределений. Из этого рисунка видно, что дислокационная структура поляризована относительно знака дислокаций: в отличие от случая $\beta = 1$, $\delta = 1$ [10] при наличии изгиба границы ячеек $\rho_{+}(x)$ и $\rho_{-}(x)$ не совмещаются в пространстве. Совмещение границ имеет место через $N = \Lambda_{-} / (\Lambda_{-} - \Lambda_{+})$ периодов, где $N = \delta / (\delta - 1)$. Для модельной структуры (рис. 1, а) $N = 5$.

Рис. 1, б демонстрирует распределение в кристалле полной плотности дислокаций обоих знаков для рассматриваемой структуры. Из-за разницы периодов распределение $\rho_{+} + \rho_{-}$ имеет характер нелинейных биений с периодом повторения $N\Lambda_{+}$. В результате биений в кристалле возникает дополнительная дислокационная сверхструктура с указанной длиной волны. Из других особенностей распределения скалярной плотности отметим появление в структуре двойных границ (1, 2 на рис. 1, б). Парные границы наблюдались в ячеистой структуре деформированных кристаллов меди [3] и железа [4]. Из рис. 1, а видно, что парные границы состоят из дислокаций противоположных знаков. О разориентации решетки, связанной с такими границами, свидетельствует уменьшение внутри них дифракционного контраста [3, 4].

3. Разориентированная ячеистая структура

На рис. 2, а показано распределение избыточной (зарядовой) плотности дислокаций $\Delta\rho = \rho_{+} - \rho_{-}$, соответствующее структуре на рис. 1, а. Видно, что распределение $\Delta\rho(x)$ имеет преимущественно дипольный ха-

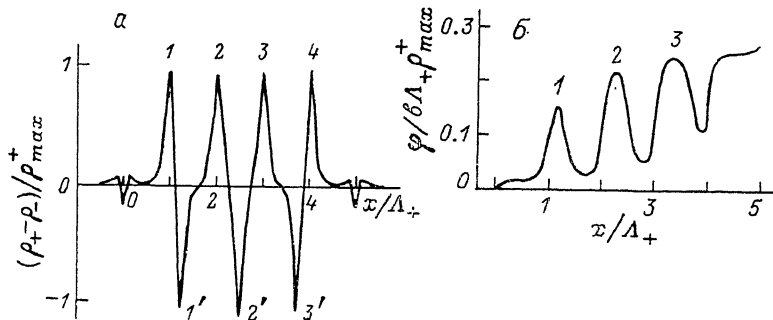


Рис. 2. Распределение избыточной плотности дислокаций одного знака $\rho_{+} - \rho_{-}$ в поляризованной ячеистой структуре (а) и соответствующее распределение углов поворота решетки φ (б).

актер. Рассматриваемая структура содержит в пределах длины волны сверхструктуры три диполя (1—1', 2—2', 3—3') и нескомпенсированную границу 4, а также мелкие мультиполи в начале и конце периода биений. Нескомпенсированные границы и дипольные образования из границ с избыточной плотностью дислокаций разного знака являются характерными элементами разориентированной ячеистой структуры, наблюдаемыми на опыте [1-5]. С континуальных позиций эти макроэлементы дислокационной структуры могут рассматриваться соответственно как дисклинационные диполи и квадрупольные образования, образованные частичными дисклинациями [1, 6-8].

Оценим разориентацию θ и повороты φ решетки, связанные с поляризацией ячеистой структуры относительно знака дислокаций. При непрерывном распределении дислокаций локальный угол разориентации, очевидно, равен $\theta = \theta_+ - \theta_-$, где $\theta_{\pm}(x) = b\Lambda_{\pm}\rho_{\pm}(x)$. Действительно, в пределе одиночной сингулярной границы получаем

$$\lim_{\Lambda_{\pm} \rightarrow 0} \theta_{\pm}(x) = \frac{1}{\Lambda_{\pm}} \int_{-\Lambda_{\pm}/2}^{\Lambda_{\pm}/2} \theta_{\pm}(x) dx = b \int_{-\Lambda_{\pm}/2}^{\Lambda_{\pm}/2} \rho_{\pm}(x) dx = \frac{b}{h_{\pm}} \delta(x_{\pm}), \quad (9)$$

где h — расстояние между дислокациями в границе, $\delta(x)$ — дельта-функция. Учитывая (9), с помощью (8) находим, что полный угол поворота решетки, связанный с отдельной границей, например $\rho_+(x)$, равен

$$\theta_{\pm} = b \int_{-\Lambda_{\pm}/2}^{\Lambda_{\pm}/2} \rho_{\pm}(x) dx = \frac{f_{\pm} + 1}{2f_{\pm}^{3/2}} b\Lambda_{\pm}\rho_{\pm}^{\pm}. \quad (10)$$

Аналогичную оценку можно получить и для границ $\rho_-(x)$. Найдем распределение локальных поворотов $\varphi(x)$ в поляризованной ячеистой структуре. Поскольку $\rho_+ - \rho_- = b^{-1}\partial\varphi/\partial x$, то

$$\varphi(x) = b \int_0^x (\rho_+ - \rho_-) dx = I_+'(x) - I_-(x), \quad (11a)$$

$$I_{\pm}(x) = \frac{b\Lambda_{\pm}\rho_{\pm}^{\pm}}{2\pi f_{\pm}} \left[\frac{f_{\pm} + 1}{f_{\pm}^{1/2}} \arctg \left(f_{\pm}^{1/2} \operatorname{tg} \pi \frac{x}{\Lambda_{\pm}} \right) + \frac{1}{2} \frac{(f_{\pm} - 1) \sin 2\pi(x/\Lambda_{\pm})}{1 + (f_{\pm} - 1) \sin^2 \pi(x/\Lambda_{\pm})} \right]. \quad (11b)$$

На рис. 2, б показаны результаты расчета $\varphi(x)$ для рассматриваемой модельной структуры. Видно, что с диполями $I-3$ (рис. 2, а) связаны повороты решетки в противоположных направлениях. Из-за неполной компенсации диполей и наличия нескомпенсированных границ типа 4 (рис. 2, а) решетка в пределах длины сверхструктурного элемента повернута относительно его начала на угол $\varphi_N = N\theta_+ - (N-1)\theta_- \approx \theta_+$, где $\theta_+ \approx \theta_-$ — полные углы разориентации, связанные с отдельными границами $\rho_+(x)$ и $\rho_-(x)$. Поворот элемента обусловлен, очевидно, общим пластическим изгибом кристалла или части его объема.

В заключение приведем количественную оценку максимальных углов разориентации. Согласно (10), $\theta_{\pm}^{\max} \approx 0.5f_{\pm}^{1/2}/b\Lambda_{\pm}\rho_{\pm}^{\pm}$. При $\eta_{\pm} \ll 1$ из (7), (8) находим $\rho_{\pm}^{\pm} \approx (6\kappa_f/5\kappa_a)^2$, $f_{\pm} \approx 4/\eta_{\pm}$. Следовательно, при $\lambda_{\pm}^{\pm} = \lambda_D$ получаем

$$\theta_{\pm}^{\max} \approx 3\pi (b\kappa_f/\kappa_a) [(\xi - 1)\lambda_D/b\kappa_a]^{1/2}. \quad (12)$$

Величина в квадратной скобке в (12) приблизительно равна единице и не зависит от структуры кристалла [10]. Коэффициенты аннигиляции винтовых дислокаций в металлах есть величины порядка $\kappa_a \approx 3 \div 5$ [12], а коэффициент размножения винтовых дислокаций на дислокациях леса $b\kappa_f \approx 10^{-2}$ [11, 13], поэтому $\theta_{\pm}^{\max} \approx (2 \div 4) \cdot 10^{-2}$. Следовательно, третьему участку кривой деформационного упрочнения, где аннигилируют винтовые дислокации [12], соответствует слабоориентированная ячеистая структура с максимальными углами разориентации $\theta \approx 1 \div 2^\circ$ и предельной плотностью дислокаций в границах $\rho_{\max} \approx 10^9 \div 10^{10} \text{ см}^{-2}$.

Список литературы

- [1] Рыбин В. В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
- [2] Gil Sevillano J., Aernoudt E. // Mater. Sci. Eng. 1987. V. 86. N 2. P. 35—51.
- [3] Kawasaki L. J. // Phys. Soc. Jap. 1974. V. 36. N 1. P. 142—149.
- [4] Ikeda S. J. // Phys. Soc. Jap. 1969. V. 27. N 6. P. 1564—1578.

- [5] Конева Н. А., Лычагин Д. В., Жуковский С. П., Козлов Э. В. // ФММ. 1985. Т. 60. № 1. С. 171—180.
- [6] Де Вит Р. Континуальная теория дислокаций. М.: Мир, 1977. 206 с.
- [7] Панин В. Е., Лихачев В. А., Гриняев Ю. В. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985. 229 с.
- [8] Владимиров В. И., Романов А. Е. Дисциплины в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 223 с.
- [9] Indenbom V. L., Orlov A. N. // Cryst. Res. Technol. 1984. V. 19. N 6. P. 733—746.
- [10] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 175—180.
- [11] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 10. С. 3174—3177.
- [12] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 7. С. 2067—2072.
- [13] Смирнов Б. И. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Л.: Наука, 1981. 235 с.

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

Поступило в Редакцию
5 января 1989 г.
