УДК 548.12

ЗАКОНОМЕРНОСТИ УПРОЧНЕНИЯ, СОЗДАВАЕМОГО АНСАМБЛЕМ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ДИПОЛЕЙ

Г. В. Бушуева, И. Е. Кондорский

Применительно к кристаллам MgO, где диполи являются доминирующим типом дислокационных конструкций при деформировании сжатием в широком интервале температур, с помощью метода моделирования на ЭВМ процесса прохождения гибкой дислокации через ансамбли диполей различной плотности исследовалась функциональная зависимость напряжения течения от плотности диполей. При плотностях диполей, меньших некоторой величины ρ^*, действие диполей оказывается аналогичным действию точечных препятствий (сосредоточенных сил): $\tau \sim \sqrt{\rho}$. При $\rho > \rho^*$ при оценке вклада диполей в упрочнение необходимо учитывать тонкую структуру поля напряжений диполя. В этом случае τ оказывается пропорциональным ρ.

Известно [1], что дислокационные ансамбли вносят существенный вклад в процессы деформационного упрочнения кристаллов. Одним из широко распространенных типов ансамблей являются ансамбли дислокационных диполей. Они служат характерным структурным элементом полос скольжения в ГЦК ионных кристаллах [2], преобладают на ранней стадии деформации в ГПУ кристаллах [3–6], в большом количестве возникают при деформировании кристаллов ультразвуком [7].

В соответствии с имеющимися моделями деформационного упрочнения оценку вклада различных ансамблей в упрочнение обычно проводят на основе соотношения [1, 8]

$$\tau = \alpha G b \sqrt{\rho}, \tag{1}$$

где τ — напряжения течения кристалла, ρ — поверхностная плотность дислокаций, G — модуль сдвига, b — вектор Бюргерса, α — безразмерный коэффициент. Однако в случае, когда дислокационная структура составлена преимущественно из диполей, экспериментально обнаружена [9] линейная зависимость напряжения течения от плотности диполей

$$\tau \sim \rho. \tag{2}$$

Этот результат автор [9] объясняет исходя из предположения, что в процессе деформации движущиеся дислокации должны преодолевать некоторую среднюю величину поля напряжений, создаваемого ансамблем диполей. По оценкам, сделанным в [1], для ансамбля диполей, составленных из прямолинейных краевых дислокаций, распределенных в пространстве по случайному закону, эта величина пропорциональна плотности диполей ρ. Подобная зависимость получена и в [10] для упорядоченной сетки краевых диполей.

В настоящей работе для исследования функциональной зависимости напряжения течения от плотности диполей сделана попытка использовать возможности метода моделирования на ЭВМ. В [11] описаны результаты моделирования процесса прохождения гибкой скользящей дислокации через ансамбли диполей различной плотности. Расчеты проводились применительно к кристаллам MgO, где дислокационные диполи являются доминирующим типом дислокационных конструкций при деформировании сжатием в широком интервале температур от азотных до 0.8 $T_{пл}$ [12]. С целью обеспечения максимального соответствия модели реальной си-

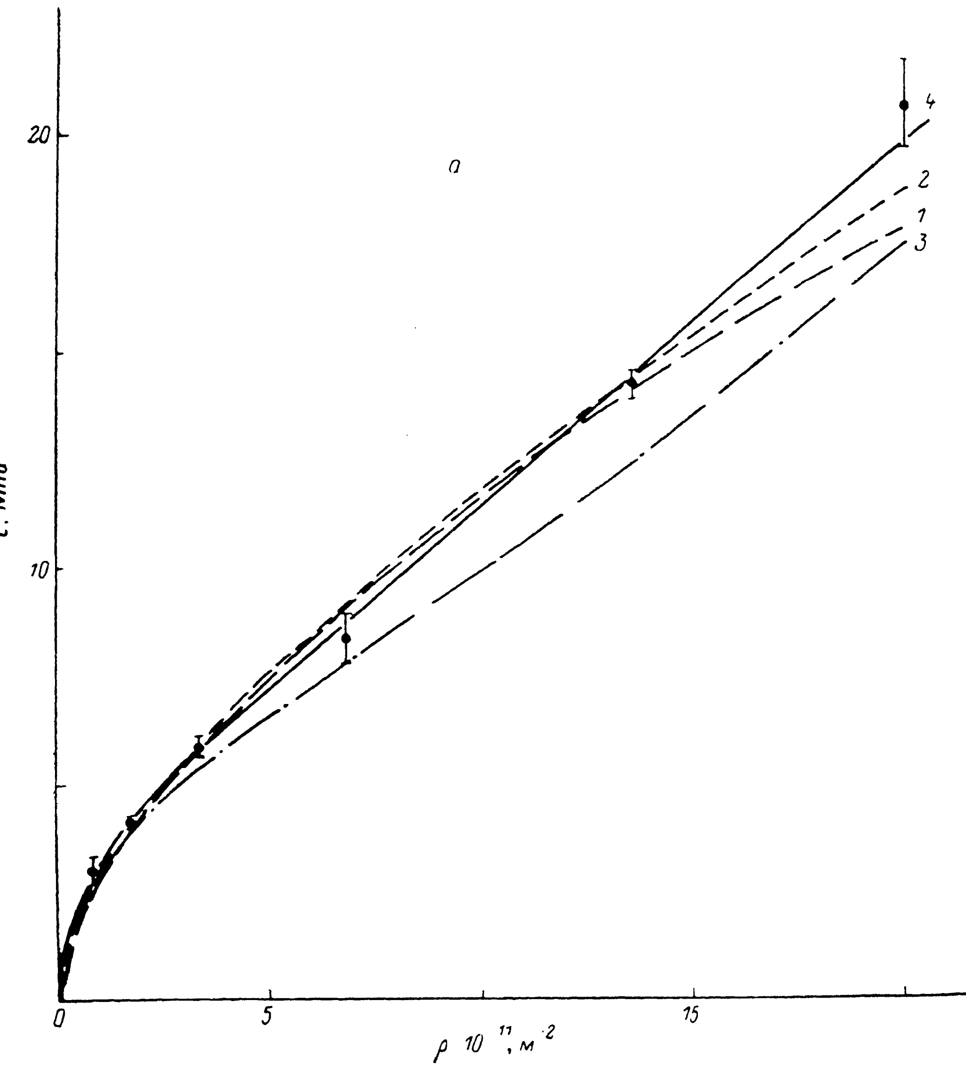

Рис. 1. Зависимость напряжения прохождения гибкой дислокации через ансамбль диполей конечных размеров от плотности диполей ρ (*а*) и $\sqrt{\rho}$ (*б*).

Точки — значения $\tau_{мод}$, полученные при моделировании на ЭВМ. Кривые отвечают аппроксимирующим функциям $\tau_1 = A_1\rho^n$ (*1*); $\tau_2 = B_2\sqrt{\rho}\,(1 + C_2\sqrt{\rho})$ (*2*); $\tau_3 = B_3\sqrt{\rho}\,(1 + C_3\sqrt{\rho} + D_3\rho)$ (*3*); $\tau_4 = A_4\sqrt{\rho}$, $\rho \leqslant \rho^*_{min}$, $B_4\rho$, $\rho \geqslant \rho^*_{min}$ (*4*).

туации в основу расчетов были положены полученные в [12] электронно-микроскопические данные о размерах и плотностях диполей в кристаллах MgO, деформированных сжатием до степени деформации ~3 % при комнатной температуре. Согласно [12], диполи имеют форму узких призматических петель преимущественно краевого типа, а их объемная плотность ρ_v составляет $\sim 5 \cdot 10^{18}$ м$^{-3}$. Поэтому моделирование в [11] проводилось в предположении, что диполи представляют собой узкие краевые петли прямоугольной формы (диполи конечных размеров) с плоскостями залегания (110) и векторами Бюргерса $\pm 1/2$ [110]. Считалось также, что диполи располагаются в объеме кристалла случайным образом, а гибкая дислокация скользит в плоскости (110), перпендикулярной плоскостям залегания диполей, и имеет вектор Бюргерса, равный 1/2 [110]. Значение ρ_v варьировалось от $5.7 \cdot 10^{17}$ до $1.4 \cdot 10^{19}$ $м^{-3}$. Размеры диполей задавались в соответствии с экспериментально полученной гистограммой распределе-

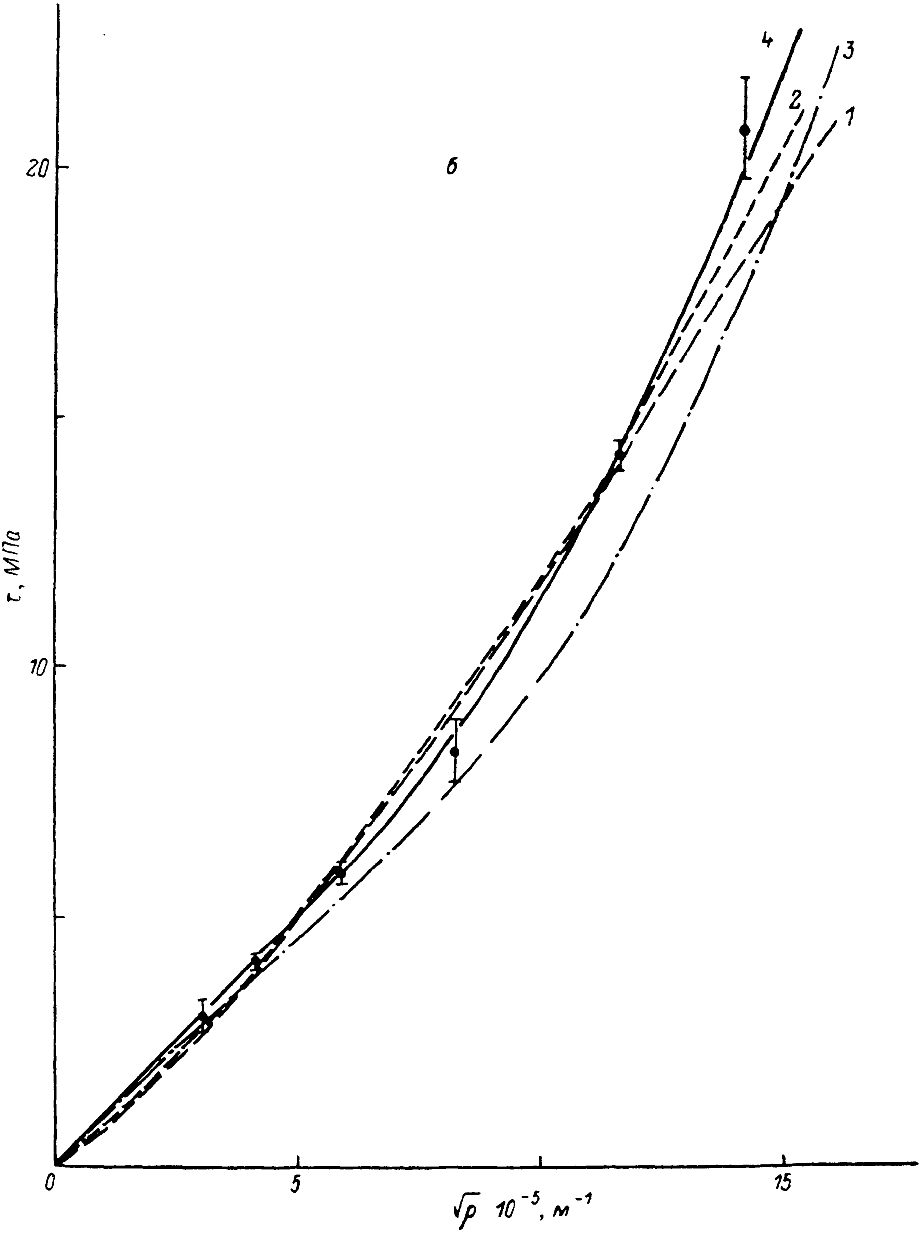

Рис. 1 (*продолжение*)

ния. Выбор модельного объема определялся характером затухания полей напряжения диполей [13] и составлял 20×20×0.15 мкм.

Не останавливаясь подробно на особенностях и деталях моделирования (см. [11]), укажем лишь, что процесс прохождения гибкой дислокации через ансамбль диполей рассматривался в квазистатическом приближении как последовательность равновесных состояний при постепенно увеличивающемся внешнем напряжении. Величина внешнего напряжения, при котором гибкая дислокация «проходит» площадку моделирования, —

напряжение прохождения $\tau_{мод}$ — принималось за напряжение течения. Совокупность значений $\tau_{мод}$ при различных плотностях диполей проведена на рис. 1, *а*, *б*.[1]

Соответствующие этим значениям величины $\alpha_{мод}$, полученные из соотношения (1) при подстановке в него $\tau_{мод}$, приведены на рис. 2. Видно, что коэффициент $\alpha_{мод}$ не остается постоянным при изменении плотности диполей и, следовательно, соотношение (1) во всем интервале рассматриваемых плотностей диполей в ансамбле не выполняется.

С целью определения напряжения прохождения τ по известной плотности диполей ρ связь между $\tau_{мод}$ и ρ аппроксимировалась вначале степенной функцией

$$\tau_1 = A_1 \rho^n. \tag{3}$$

Обработка по методу линейной регрессии функции $\ln \tau_1$ показала, что $n=0.62\mp 0.01$ и только в интервале плотностей до $\rho_0=3.4\cdot 10^{11}$ м$^{-2}$ ($\rho_v=2.3\cdot 10^{18}$ м$^{-3}$) зависимость τ (ρ) может быть аппроксимирована квадратичной параболой $n=0.50\mp 0.05$. Функция τ_1 (ρ) изображена на рис. 1, *1*.

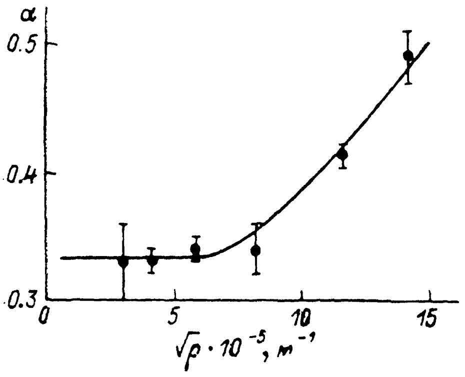

Рис. 2. Зависимость коэффициента α от $\sqrt{\rho}$. Точки — $\alpha_{мод}$, кривая — аппроксимирующая функция α_4 (ρ)

Для выяснения причин нарушения зависимости $\tau - \sqrt{\rho}$ при возрастании плотности диполей $\rho > \rho_0$ была сделана попытка воспользоваться следующей простой моделью. В [13] показано, что напряжение, создаваемое диполем конечных размеров, отлично от нуля в ограниченной области пространства (назовем эту область областью «действия» диполя). При оценке упрочняющего действия таких диполей будем полагать, что действие диполя на дислокацию в этой области аналогично действию недеформируемой частицы выделения [14]. Определяя из данных моделирования площади, занятые «областями действия» диполей на плоскости скольжения пробной дислокации при заданной плотности ρ, и принимая, что эти области имеют форму круга, легко оценить их средний диаметр, который оказался равным $d_{ср}=0.457$ мкм. Далее, следуя [14], примем, что

$$\tau = \alpha Gb/(1/\sqrt{\rho} - d_{ср}) = \alpha Gb\,(1 - d_{ср}\sqrt{\rho})^{-1}.$$

При $d_{ср}\sqrt{\rho} < 1$ выражение в скобках можно разложить в ряд Тейлора по степеням ρ

$$\tau = \alpha Gb\sqrt{\rho}\,(1 + d_{ср}\sqrt{\rho} + d_{ср}^2\rho + \ldots). \tag{4}$$

При выбранных плотностях диполей: $\rho_v=5.7\cdot 10^{17}$, $1.1\cdot 10^{18}$, $2.3\cdot 10^{18}$, $4.5\cdot 10^{18}$, $9\cdot 10^{18}$ и $1.4\cdot 10^{19}$ м$^{-3}$ ($\rho=9.0\cdot 10^{10}$, $1.7\cdot 10^{11}$, $3.4\cdot 10^{11}$, $6.8\cdot 10^{11}$,

---

[1] Следует заметить, что значения ρ несколько отличаются от приведенных на соответствующих графиках в [11]. Это объясняется различным способом определения поверхностной плотности ρ на основании заданной объемной ρ_v. Можно предложить три таких способа: определять ρ из соотношения $\rho = (\sqrt[3]{\rho_v})^2$; находить ρ по числу выходов диполей на площадку, перпендикулярную как плоскостям их залегания, так и плоскости скольжения пробной дислокации (этот второй способ принят в [11]); и наконец, подсчитывать число диполей, создающих поля напряжений на плоскости скольжения пробной дислокации (число «действующих» диполей). В этом случае «действующими» являются диполи, располагающиеся в модельном объеме. Последний вариант представляется нам более корректным с физической точки зрения, и именно он был принят в настоящей работе. При этом, как показал анализ, различие в определении ρ не влияет на конечный вывод, сделанный в работе.

1.4·10^{12}, 2.0·10^{12} $м^{-2}$) величины $d_{ср}\sqrt{\rho}$ составляют 0.14, 0.19, 0.27, 0.37, 0.53 и 0.65 соответственно. Следовательно, в (4) следует учитывать члены с более высокими, чем 0.5, степенями ρ. Поэтому в рамках данной модели имеет смысл использовать следующие функции для аппроксимации зависимости τ (ρ):

$$\tau_2 = B_2\sqrt{\rho}\,(1 + C_2\sqrt{\rho}), \quad \tau_3 = B_3\sqrt{\rho}\,(1 + C_3\sqrt{\rho} + D_3\rho). \qquad (5), (6)$$

Аппроксимация проводилась по методу наименьших квадратов. Полученные зависимости τ_2 (ρ) и τ_3 (ρ) представлены на рис. 1, *2*, *3*. Проверка согласия значений τ, найденных из соотношений (3), (5), (6), данным моделирования проводилась на основе критерия $\bar{\chi}^2$ [15]. Результаты ее показали, что вероятности P ($\bar{\chi}^2 \geqslant \bar{\chi}_0^2$) получения $\bar{\chi}^2$, не меньшего, чем полученное $\bar{\chi}_0^2$, для функции τ_1 меньше 1 % и для τ_3 меньше 0.05 %. Более того, в выражении (6) C_3 должно соответствовать $d_{ср}$, однако аппроксимация дала $C_3 < 0$. Таким образом, зависимости (3) и (6) следует отвергнуть как невероятные.

В то же время кривая $\tau = A_1\sqrt{\rho}$ для плотностей диполей $\rho \leqslant \rho_0$ согласуется с данными моделирования на 90%-ном уровне значимости, а кривая τ_2 (ρ) не может быть отвергнута на 10%-ном уровне значимости. Эти результаты дают основание попытаться аппроксимировать данные моделирования некоторой совокупной кривой τ_4 (ρ), составленной из участка квадратичной параболы $A_4\sqrt{\rho}$ при $\rho \leqslant \rho^*$ и прямой $B_4\rho$ при $\rho \geqslant \rho^*$. Аппроксимация проводилась методом наименьших квадратов. На рис. 3 приведена зависимость среднеквадратичного отклонения χ^2 от ρ^*. Видно, что минимальное значение χ^2 соответствует величине ρ^*_{min}=3.36·10^{11} $м^{-2}$. Кривая τ_4 (ρ), отвечающая этому значению ρ^*, представлена на рис. 1, *4*. Видно, что данные моделирования хорошо ложатся на эту кривую. Оценка на основе критерия $\bar{\chi}^2$ дает согласие на 94%-ном уровне значимости. Подставляя значения τ_4 в соотношение (1), можно в свою очередь получить зависимость α_4 (ρ) (сплошная кривая на рис. 2), которая также хорошо описывает данные моделирования $\alpha_{мод}$ (ρ) (в этом случае согласие на 80%-ном уровне значимости).

Рис. 3. Зависимость суммы квадратов отклонения χ^2 от ρ^* для кривой τ_4 (ρ).

Представляет интерес сравнить средний размер областей «действия» диполей $d_{ср}$ со средним расстоянием L между точками «зацепления» дислокаций на этих областях при $\tau_{мод}$. Анализ данных моделирования показал, что $L \approx 1.46/\sqrt{\rho}$. При этом $\bar{d} = d_{ср}/L$ для выбранных при моделировании плотностей диполей составляет соответственно 0.09, 0.13, 0.18, 0.26, 0.36, 0.44. Следовательно, пока значения $\bar{d}$ не превышают некоторой критической величины $\bar{d}_{кр}$=0.18; напряжение прохождения τ через ансамбль диполей может быть описано соотношением (1), тогда как при $\bar{d} > \bar{d}_{кр}$ оно подчиняется закону (2).

Таким образом, результаты работы позволяют заключить, что при $\bar{d} \leqslant \bar{d}_{кр}$ действие диполя конечного размера на скользящую дислокацию можно считать аналогичным действию сосредоточенно силы (точечного препятствия), а вклад ансамбля диполей в упрочнение оценивать по формуле (1), как и для ансамбля точечных препятствий. Однако при $\bar{d} > \bar{d}_{кр}$ необходимо принимать во внимание тонкую структуру поля напряжений, создаваемого диполем.

Авторы выражают глубокую признательность Н. А. Тяпуниной за полезные дискуссии, сделанные замечания и постоянный интерес к работе.

Список литературы

[1] Фридель Ж. Дислокации: Пер. с англ. М., 1967. 643 с.
[2] Смирнов Б. И. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Л., 1981. 234 с.
[3] Hirsch P. B., Lally J. S. // Phil. Mag. 1965. V. 12. N 117. P. 595—648.
[4] Sharp J. V., Makin M. J., Christian J. W. // Phys. St. Sol. 1965. V. 11. N 2. P. 845—864.
[5] Лаврентьев Ф. Ф., Похил Ю. А. // ФММ. 1972. Т. 34. № 6. С. 1270—1278.
[6] Лаврентьев Ф. Ф., Похил Ю. А. // Изв. АН СССР. 1974. Т. 38. № 7. С. 1540—1545.
[7] Тяпунина Н. А., Благовещенский В. В., Зиненкова Г. М., Ивашкин Ю. А. // Изв. вузов, физика. 1982. № 6. С. 118—128.
[8] Набарро Ф. Р. Н., Базинский З. С., Холт Д. Б. Пластичность чистых монокристаллов: Пер. с англ. М., 1967. 214 с.
[9] Сокольский С. В. // ФММ. 1983. Т. 55. № 1. С. 165—170.
[10] Kratochvil P. // Acta Metall. 1968. V. 16. P. 1023—1026.
[11] Бушуева Г. В., Кондорский И. Е., Тяпунина Н. А., Фролова Р. Д., Бережкова Г. В., Перстнев П. П. // Деп. ВИНИТИ. 1986. № 5957-В86.
[12] Перстнев П. П. // Автореф. канд. дис. М., 1983.
[13] Бушуева Г. В., Кондорский И. Е., Тяпунина Н. А., Фролова Р. Д. // Деп. ВИНИТИ. 1984. № 7666-84.
[14] Фридель Дж. // Физика прочности и пластичности: Пер. с англ. М., 1972. С. 152—158.
[15] Тейлор Дж. Введение в теорию ошибок: Пер. с англ. М., 1985. 272 с.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова
Москва

Поступило в Редакцию
11 мая 1989 г.