

УДК 539.3

ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИОННЫХ СКОПЛЕНИЙ

С. И. Сивер, Л. А. Зильберман, О. И. Дацко

Метод Эшелби, Франка, Набарро обобщен для описания колебаний плоского скопления дислокаций, удерживаемого запертой головной дислокацией и постоянным напряжением. Колебания совершаются под действием малой внешней силы. Рассчитан вклад дислокационного скопления в амплитудно-независимое внутреннее трение. Показано, что в случае большого числа дислокаций в скоплении точное решение и решение, полученное в континуальном приближении, совпадают при не очень больших частотах вынуждающей силы ($\omega \tau \ll n$). Здесь $\epsilon = nBA/2(bc)^2$, n — число дислокаций в скоплении, B — коэффициент вязкого трения, A — константа взаимодействия дислокаций, b — величина вектора Бюргерса, c — внешнее постоянное напряжение. Головные дислокации в этом случае не колеблются.

1. Одним из элементов дислокационной структуры, играющих важную роль в механическом поведении кристаллов, являются плоские дислокационные скопления (ДС). Большое количество работ посвящено таким вопросам, как динамика ДС [1–4], дислокационные механизмы зарождения трещины [5], вклад ДС во внутреннее трение [6, 7] и др. Можно выделить два основных подхода, используемых для описания ДС. Дискретное описание методом ортогональных полиномов применялось в основном для исследования равновесных конфигураций плоских ДС. Динамика ДС этим методом рассмотрена лишь в случаях наиболее простых запирающих полей напряжения [1–3]. Большое количество исследований как статики ДС, так и динамики ДС выполнено в континуальном приближении методом сингулярных интегральных уравнений. Этот метод эффективен в тех случаях, когда число дислокаций в скоплении велико и упругое поле вычисляется на достаточно большом расстоянии от скопления. В других же случаях этот подход может приводить к неправильным результатам (основные ограничения при использовании континуального приближения проанализированы в книге Владимирова [5], а также в [8, 9]). Поэтому представляют интерес задачи, которые могут быть решены обоими методами и в которых можно определить условия перехода от точного решения к решению в континуальном приближении. Одной из них, как будет показано ниже, является задача об амплитудно-независимом внутреннем трении, обусловленном плоскими ДС. В континуальном приближении точное решение этой задачи получено в [7]. Авторами этой работы рассмотрен случай, когда скорость дислокации — линейная функция напряжения, а сила торможения дислокации — сила сухого трения.

В настоящей работе в дискретном приближении рассмотрены колебания плоского ДС под действием малого внешнего напряжения. Анализируется случай, когда скопление удерживается запертой головной дислокацией и постоянным напряжением. Эта модель представляет практический интерес с точки зрения возможности зарождения микроскопической трещины, а также при изучении процессов преодоления препятствий при движении дислокаций за счет возрастания внутренних напряжений. Метод, развитый в работе, позволяет «следить» за движением каждой дислокации, что особенно важно при исследовании дислокационных перестроек скоплений. Результаты расчета использованы для вычисления внутреннего трения и сравниваются с результатами, полученными в континуальном приближении.

2. Выберем систему координат таким образом, чтобы закрепленная головная дислокация находилась в начале координат, а ряд из n свободных прямолинейных дислокаций был расположен вдоль положительной части оси X . Уравнение движения i -й дислокации скопления, расположенной в точке $x=x_i(t)$, будет иметь вид

$$B\dot{x}_i - \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n \frac{A}{x_i - x_j} - \frac{A}{x_i} + b[\varepsilon + \sigma_1(t)] = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (1)$$

где B — коэффициент вязкого трения дислокации; σ и $\sigma_1 = \sigma_0 \cos \omega t$ — внешние напряжения; $A = Gb^2 [\sin \alpha + (1-\nu) \cos \alpha] [2\pi(1-\nu)^{-1}]$; α — угол между линией дислокации и ее вектором Бюргерса; b — величина вектора Бюргерса; G — модуль сдвига; ν — коэффициент Пуассона.

Следуя Эшелби, Франку и Набарро [10], введем полином

$$f(x, t) = \prod_{i=1}^n [x - x_i(t)].$$

Тогда

$$\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n \frac{1}{x_i - x_j} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^{-1} \Big|_{x=x_i}, \quad \dot{x}_i = - \left[\frac{\partial f}{\partial t} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^{-1} \right]_{y=x_i}.$$

Если за единицу длины принять величину $x_0 = A(2b\varepsilon)^{-1}$, а за единицу времени $t_0 = BA(b\varepsilon)^{-2}/2$ и ввести обозначение $\tau_0 = \varepsilon_0/\varepsilon$, то аналогично тому, как это делается в [10], получим следующее дифференциальное уравнение, эквивалентное системе (1):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \left(\frac{2}{x} - 1 - \tau_0 \cos \omega t \right) \frac{\partial f}{\partial x} + Q(n, x, t) f = 0. \quad (2)$$

Функция $Q(n, x, t)$ выбирается таким образом, чтобы уравнение (2) имело решение в форме полинома n -ой степени и нули этого полинома не совпадали с полюсами функции $Q(n, x, t)$. В амплитудно-независимой области достаточно найти решение в первом приближении по τ_0

$$f(x, t) = f_0(x) + f_1(x, t), \quad Q(n, x, t) = \frac{1}{x} [q_0 + q_1(t)].$$

Уравнение для f_0 описывает равновесие линейных рядов дислокаций и рассмотрено в [10]

$$x \frac{d^2 f_0}{dx^2} + (2-x) \frac{df_0}{dx} + q_0 f_0 = 0.$$

Решением этого уравнения при $q_0 = n$ являются обобщенные полиномы Лагерра

$$f_0 = (-1)^n n! L_n^1(x).$$

В размерном виде

$$f_0(x) = (-1)^n n! L_n^1 \left(\frac{2b\varepsilon x}{A} \right).$$

Для $f_1(x, t)$ имеем

$$x \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\partial^2 f_1}{\partial x^2} \right) + (2-x) \frac{\partial f_1}{\partial x} + nf_1 = -q_1 f_0 + x\tau(t) \frac{df_0}{dx}. \quad (3)$$

Обычно применение метода Эшелби, Франка, Набарро ограничено изучением случаев, когда функция $Q(n, x, t)$ находится приравниванием нулю членов с высшей и следующей за ней степенью x в уравнении для $f(x, t)$. В рассматриваемой здесь задаче эта процедура не приводит к успеху. Поэтому ниже поступим следующим образом. Найдем установившееся по времени решение

уравнения (3) при произвольном q_1 и выберем q_1 из условия, чтобы это решение было полиномом $(n-1)$ -степени по x .

3. Представим переменное напряжение $\tau(t)$, $f_1(x, t)$ и $q_1(t)$ в комплексном виде

$$\tau(t) = \tau_0 e^{i\omega t}, \quad f_1(x, t) = f_{10}(x) e^{i\omega t}, \quad q_1(t) = q_{10} e^{i\omega t}.$$

Тогда уравнение (3) запишется следующим образом:

$$x \frac{d^2 f_{10}}{dx^2} + (2-x) \frac{df_{10}}{dx} + (n+i\omega x) f_{10} = (-1)^{n+1} n! [\delta_1 L_n^1(x) + \delta_2 L_{n-1}^1(x)], \quad (4)$$

где

$$\delta_1 = q_{10} - n\tau_0, \quad \delta_2 = (n+1)\tau_0.$$

Решение уравнения (4) будем искать в виде интеграла по замкнутому контуру в окрестности нулевой точки

$$f_{10}(x) = \frac{(-1)^{n+1} n!}{2\pi i} \oint^{(0+)} e^{xt} t^{-n} g(t) dt. \quad (5)$$

Подставляя (5) в (4) и воспользовавшись представлением обобщенных полиномов Лагерра в виде интеграла по тому же контуру, для $g(t)$ имеем

$$g - \left[\frac{n}{t} + \frac{n+1}{(t-\alpha_1)(t-\alpha_2)} \right] g = \frac{(t-1)^n [(\delta_1 + \delta_2)t - \delta_1]}{t(t-\alpha_1)(t-\alpha_2)}. \quad (6)$$

Здесь

$$\alpha_1 = (1 + \sqrt{1 - 4i\omega})/2, \quad \alpha_2 = (1 - \sqrt{1 - 4i\omega})/2. \quad (7)$$

Общее решение уравнения (6) будет иметь вид

$$g = t^n (t-\alpha_1)^k (t-\alpha_2)^{-k} \left\{ C + \int_{\alpha_2}^t dz z^{-(n+1)} \varphi(z) [(\delta_1 + \delta_2)z - \delta_1] \right\}, \quad (8)$$

$$\varphi(t) = (t-1)^n (t-\alpha_1)^{-k-1} (t-\alpha_2)^{k-1},$$

C — постоянная интегрирования,

$$k = (n+1)/(\alpha_1 - \alpha_2). \quad (9)$$

Чтобы представление (5) было полиномом $(n-1)$ -й степени, функция $g(t)$ должна быть регулярна. Для этого выбираем δ_1 таким образом, чтобы коэффициент с $\ln t$ в разложении $g(t)$ в ряд Тейлора обращался в нуль. Из этого условия находим

$$\delta_1 = \frac{n\varphi^{(n-1)}(0)}{\varphi^{(n)}(0) - n\varphi^{(n-1)}(0)} \delta_2. \quad (10)$$

Пользуясь теоремой Лейбница о дифференцировании произведения функций $(t-1)^n$ и $(t-\alpha_1)^{-k-1}(t-\alpha_2)^{k-1}$ и формулами линейного преобразования гипергеометрической функции $F(a, b, c, z)$ [11], $\varphi^{(n-1)}(t)$ можно представить в виде

$$\varphi^{(n-1)}(t) = A_1 (t-1) (t-\alpha_2)^{-(n+1)} \sum_{l=0}^{\infty} \binom{-k-1}{l} \times$$

$$\times \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2 - \alpha_1} \right)^e F(1+k+l, n+1, 2, \frac{t-1}{t-\alpha_2}),$$

где

$$A_1 = n! \alpha_1^{n+k} (\alpha_2 - \alpha_1)^{-k-1}.$$

Вычисляя сумму по формуле (11)

$$\sum_{e=0}^{\infty} \binom{\lambda}{e} s^e F(e-\lambda, b, c, z) = (1+s)^{\lambda} F\left(-\lambda, b, c, \frac{z}{1+s}\right),$$

получим

$$\begin{aligned} \varphi^{(n-1)}(t) &= A_1 \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2} \right)^{k+1} (t-1)(t-\alpha_2)^{-(n+1)} \times \\ &\quad \times F\left(k+1, n+1, 2, \frac{(t-1)(\alpha_2 - \alpha_1)}{\alpha_2(t-\alpha_2)}\right). \end{aligned}$$

Дифференцируя полученное выражение и воспользовавшись соотношением

$$z \frac{d}{dz} F(a, b, c, z) = a [F(a+1, b, c, z) - F(a, b, c, z)],$$

имеем

$$\begin{aligned} \varphi^{(n)}(0) &= n \varphi^{(n-1)}(0) + A_1 \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2} \right)^{k+1} (-1)^n \alpha_2^{-(n+1)} (n+1) \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \times \\ &\quad \times F(k+1, n+2, 2, (\alpha_2 - \alpha_1) \alpha_2^{-2}). \end{aligned}$$

Подставляя $\varphi^{(n-1)}(0)$ и $\varphi^{(n)}(0)$ в (10), находим

$$\delta_1 = \frac{n \alpha_2^2 F(k+1, n+1, 2, (\alpha_2 - \alpha_1) \alpha_2^{-2})}{(n+1) \alpha_1 F(k+1, n+2, 2, (\alpha_2 - \alpha_1) \alpha_2^{-2})} \delta_2.$$

Если еще раз воспользоваться линейным преобразованием для гипергеометрической функции

$$F(a, b, c, z) = (1-z)^{-a} F\left(a, c-b, c, \frac{z}{z-1}\right),$$

то можно представить δ_1 в виде отношения двух многочленов

$$\delta_1 = \frac{\alpha_2 n F(k+1, 1-n, 2, z)}{\alpha_1 (n+1) F(k+1, -n, 2, z)} \delta_2, \quad z = \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1^2}. \quad (11), (12)$$

Это выражение удобно для точного вычисления δ_1 , когда число дислокаций в скоплении невелико.

4. Пластическая деформация ε , обусловленная движением незакрепленных дислокационных сегментов длиной l в объеме V , равна

$$\varepsilon = \frac{lb}{V} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (13)$$

Сумму корней полинома $f(x, t)$ можно выразить через коэффициент a_{n-1} : ($f_1 = a_{n-1}x^{n-1} + a_{n-2}x^{n-2} + \dots + a_0$). Из уравнения (4)

$$a_{n-1} = -\operatorname{Re} [\delta_1(i\omega)^{-1} e^{i\omega t}].$$

Таким образом, для точного вычисления внутреннего трения Q^{-1} достаточно знать δ_1

$$Q^{-1} = -Q_0^{-1} [(\omega \tau_0)^{-1} \operatorname{Re} \delta_1], \quad Q_0^{-1} = GIA/2V\tau^2. \quad (14)$$

Здесь ω , так же как и раньше, — безразмерная частота. Практический интерес представляет случай $n \gg 1$. Ограничимся также рассмотрением не очень больших частот $\omega n \sim 1$. При этом аргумент гипергеометрической функции в (11), как следует из (12) и (7), стремится к единице. Поэтому воспользуемся линейным преобразованием

$$F(k+1, 1-n, 2, z) = \frac{\Gamma(n-k)}{\Gamma(1-k) \Gamma(n+1)} F(k+1, 1-n, k-n+1, 1-z),$$

$$F(k+1, -n, 2, z) = \frac{\Gamma(n-k+1)}{\Gamma(1-k)\Gamma(n+2)} F(k+1, -n, k-n, 1-z).$$

Выражая $F(k+1, 1-n, k-n+1, 1-z)$ через смежные функции $F(k+1, -n, k-n+1, 1-z)$, $F(k+1, -n, k-n+2, 1-z)$ и переходя к пределу $n \rightarrow \infty$, получим

$$\delta_1 = -\frac{J_{\beta+1}(\beta)}{J_\beta(\beta)} \delta_2,$$

$J_\beta(z)$ — функция Бесселя, $\beta = 2n\omega$. Отношение двух функций Бесселя, порядок которых отличается на единицу, можно представить в виде непрерывной дроби

$$\frac{J_{\beta+1}(\beta)}{J_\beta(\beta)} = \frac{\beta [2(\beta+1)]^{-1}}{1-} \frac{\beta^2 [4(\beta+1)(\beta+2)]^{-1}}{1-} \frac{\beta^2 [4(\beta+2)(\beta+3)]^{-1}}{1-} \dots \quad (15)$$

В таком виде решение полностью совпадает с решением, полученным в работах [6, 7]. Отличие времени релаксации τ и подвижности μ связано с рассмотрением случая вязкого трения. В нашей задаче

$$\mu = 1/Blb, \quad \tau = nBA/(b\omega)^2.$$

Так же как и в [7], для $|\beta| \leq 3$, ограничиваясь в (15) первым членом дроби, из (14) получим

$$Q^{-1} = Q_0^{-1} n \frac{\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}.$$

Оценим частоты, при которых $Q^{-1}(\omega)$ имеет максимум. Для $B \sim 10^{-5}$ Па·с, $G \sim 3 \cdot 10^{10}$ Па, $n = 20$, $A \sim Gb^2/(2\pi)^{-1}$ имеем $\omega/G = 10^{-5} \div 10^{-4}$, $\omega = 10^5 \div 10^7$ Гц.

5. Чтобы понять, к чему приводит ограничение сверху на частоту при переходе от точного решения к континуальному, рассмотрим в том же предельном случае решение уравнения (4). Для вычисления интеграла в представлении (8) сделаем замену переменной

$$z = \alpha_2^{-1}y + \alpha_2.$$

После этого

$$\int_{\alpha_2}^t dz z^{-(n+1)} \varphi(z) [(\delta_1 + \delta_2)z - \delta_1] = \alpha_2 \int_0^{\alpha_2 t - \alpha_2^2} dy (y - i\omega + \alpha_2^2)^{k-1} y^{k-1} \times \\ \times \left[\delta_1 \left(\frac{y - i\omega}{y + \alpha_2^2} \right)^{n+1} + \delta_2 \left(\frac{y - i\omega}{y + \alpha_2^2} \right)^n \right]. \quad (16)$$

Здесь учтено, что $\alpha_1 \alpha_2 = i\omega$. В рассматриваемом предельном случае $\alpha_2 \approx i\omega$. Поэтому оставляя в (16) α_2 в первой степени, находим

$$\int_{\alpha_2}^t dz z^{-(n+1)} \varphi(z) [(\delta_1 + \delta_2)z - \delta_1] \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{(\omega n \sim 1)} - \left[\frac{\delta_1}{\beta} \left(\frac{t}{t-1} \right)^\beta + \frac{\delta_2}{\beta+1} \left(\frac{t}{t-1} \right)^{\beta+1} \right].$$

Подставим полученное выражение в (8), а (8) в (5). Тогда решение уравнения (4) будет иметь вид

$$f_{10}(x) = \frac{(-1)^n n!}{2\pi i} \oint^{(0+)} dt e^{xt} \left(\frac{t - \alpha_1}{t - \alpha_2} \right)^{n+1+\beta} \left[\frac{\delta_1}{\beta} \left(\frac{t}{t-1} \right)^\beta + \frac{\delta_2}{\beta+1} \left(\frac{t}{t-1} \right)^{\beta+1} \right].$$

Сделаем замену переменной $t \rightarrow t/\alpha_2$. В результате, сохраняя лишь первую степень α_2 , получим следующее решение:

$$f_{10}(x) = \frac{(-1)^n n!}{2\pi i} \oint^{(0+)} dt e^{\frac{xt}{\alpha_2}} \left[\frac{\delta_1}{\beta} \left(\frac{t - i\omega}{t} \right)^{n+1} + \frac{\delta_2}{\beta+1} \left(\frac{t - i\omega}{t} \right)^n \right],$$

которое можно представить в виде

$$f_{10}(x) = (-1)^n \left[\frac{\delta_1}{\beta} L_n^1(x) + \frac{\delta_2}{\beta+1} L_{n-1}^1(x) \right].$$

Отклонение от положения равновесия дислокаций ($x_i^1 = x_i - x_i^0$) определяется формулой

$$x_i^1 = -\operatorname{Re} \left[\frac{f_{10}(x_i^0)}{f'_0(x_i^0)} e^{i\omega t} \right],$$

с помощью которой получим

$$x_i^1 = \frac{\delta_2 x_i^0}{n} \operatorname{Re} \frac{e^{i\omega t}}{1 + 2ni\omega}.$$

Таким образом, континуальное и дискретное описание колебаний ДС под действием малой внешней силы совпадает для не очень больших частот вынуждающей силы ($\omega\tau \ll n$). В этом диапазоне частот все дислокации колеблются в фазе с амплитудой, убывающей к голове скопления. С точностью до величин порядка n^{-1} можно считать, что головные дислокации скопления не колеблются.

Литература

- [1] Соловьев В. А. ФММ, 1972, т. 33, № 4, с. 690—697.
- [2] Соловьев В. А. ФММ, 1972, т. 34, № 4, с. 836—841.
- [3] Head A. K. Phil. Mag., 1972, v. 26, N 1, p. 43—63.
- [4] Ockendon H., Ockendon J. R. Phil. Mag., 1983, v. 47, N 5, p. 707—719.
- [5] Владимиров В. И. Физическая природа разрушения металлов. М.: Металлургия, 1984. 280 с.
- [6] Brailsford A. D. Phys. Rev., 1965, v. 139, N 6A, p. 1807—1812.
- [7] Николаев В. В., Орлов А. Н., Талуц Г. Г. В кн.: Внутреннее трение в металлических материалах. М.: Наука, 1970. 208 с.
- [8] Владимиров В. И., Приемский Н. Д. ЖТФ, 1982, т. 52, № 3, с. 559—561.
- [9] Владимиров В. И., Приемский Н. Д. ЖТФ, 1982, т. 52, № 9, с. 1721—1724.
- [10] Eshelby J. D., Frank F. C., Nabarro R. F. N. Phil. Mag., 1951, v. 42, p. 327.
- [11] Бейтмен Г., Эрдейн А. Высшие транспонентные функции. М.: Наука, 1965. 296 с.

Донецкий физико-технический институт
АН УССР

Поступило в Редакцию
30 апреля 1987 г.