

## Формирование квазикристаллических структур в ансамбле дислокаций

© Г.Ф. Сарафанов

Нижегородский государственный педагогический университет,  
603600 Нижний Новгород, Россия

(Поступила в Редакцию 25 августа 2000 г.  
В окончательной редакции 9 ноября 2000 г.)

Исследованы закономерности формирования неоднородных дислокационных структур в рамках модели, учитывающей корреляционное взаимодействие винтовых дислокаций. Установлено, что учет корреляционного взаимодействия приводит к развитию неустойчивости однородного состояния в системе. Показано, что при достижении в локальном объеме критических неравновесных условий, соответствующих этой неустойчивости, спонтанно образуется неоднородная дислокационная структура, которая по мере увеличения степени неравновесности системы трансформируется в ячеистую структуру с симметрией квазикристалла.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-02-16976).

Одной из важных проблем физического металловедения является объяснение наблюдающихся на опыте сложных закономерностей возникновения и развития неоднородных дислокационных структур, формирующихся при пластической деформации материала. Несмотря на успехи, достигнутые в области экспериментальных исследований деформируемых твердых тел [1,2], до сих пор нет строгой количественной теории, достоверно описывающей эти явления. Наряду с этим накоплено достаточно данных, позволяющих трактовать процессы пластической деформации с единых позиций — с точки зрения нелинейной динамики деформируемого кристалла [3–5]. Такая динамика, как выяснилось, связана со сложными процессами, протекающими на различных структурных деформационных уровнях, и обусловлена внутренней самоорганизацией кристалла [6]. Ввиду этого обстоятельства в последнее время анализ больших закономерностей поведения неравновесных систем, процессов их структурной перестройки проводится, как правило, на основе синергетического подхода [7,8]. В этом подходе достигается универсальность анализа систем различной природы, допускающих явления самоорганизации. Возникающие при этом пространственно неоднородные состояния (диссипативные структуры) являются результатом развития в системе неустойчивости однородного состояния (ДС-неустойчивости).

Применительно к деформируемым кристаллам впервые подобная схема анализа явлений самоорганизации в ансамбле дислокаций использована в работах [9,10]. Дальнейшее развитие данного подхода, основанное на системе кинетических уравнений, позволило получить и проанализировать некоторые характерные типы дислокационных структур, проследить этапы их эволюции (см., например, [4,11–13]). В этих работах базовой моделью, описывающей процессы формирования диссипативных дислокационных структур, послужила система реакционно-диффузионных уравнений для плотности дислокаций, которая в области ДС-неустойчивости сво-

дится к универсальному классу уравнений Свифта–Хоенберга [7,14]. Несмотря на широкий спектр возможных решений, этот класс уравнений имеет и существенные ограничения с точки зрения описания дислокационных структур. Известно [2,15], что наблюдаемые в эксперименте дислокационные ячеистые структуры трудно идентифицировать как строго периодические образования, обладающие глобальной симметрией дальнего порядка. Скорее, можно говорить о "квазикристалличности", а в некоторых случаях и о "турбулентности" дислокационных структур. Такого рода решения, однако, не могут быть получены в рамках уравнений Свифта–Хоенберга [14]. В связи с этим возникает вопрос об области применимости реакционно-диффузионных моделей эволюции ансамбля дислокаций.

Известно [16,17], что процессы диффузии обусловлены действием тепловых или иных флуктуационных полей (в случае дислокаций это прежде всего поля случайных внутренних напряжений [3]). При этом для диффузионного процесса характерна некоррелированность действия флуктуационных импульсов, что имеет место в условиях слабого взаимодействия частиц, участвующих в диффузии [17]. На развитой стадии пластической деформации, когда плотность дислокаций велика, приходится учитывать упругое взаимодействие дислокаций и как следствие динамику флуктуаций. Последнее приводит к корреляционному взаимодействию дислокаций, которое, как известно из физики плазмopodobных сред с сильным взаимодействием [17], обуславливает в ряде случаев расслоение однородного состояния и возникновение ячеистых структур ("кулоновский кристалл") [18].

Некоторые результаты, связанные с этим вопросом применительно к дислокационным ансамблям, содержатся в работах [19–21], где исходя из эвристических соображений относительно радиуса корреляции дислокаций и феноменологически заданного корреляционного потока предсказано развитие неоднородной структуры для плотности дислокаций. К сожалению, последовательный ма-

тематический анализ корреляционного взаимодействия дислокаций отсутствует, что не позволяет судить о достоверности полученных в этих работах результатов. Сложность этого анализа заключается прежде всего в том, что соответствующие корреляционные потоки имеют вид нелокальных и нелинейных функционалов, что делает прямое исследование малоперспективным с математической точки зрения.

В этой ситуации для выявления эффектов, связанных с упругим полем дислокаций, в работах [22,23] эволюция дислокационной системы была рассмотрена на модельном уровне для определенного класса физически обоснованных и решаемых задач. В качестве модельного объекта был выбран ансамбль винтовых прямолинейных дислокаций, обладающий двумерным кулоновским потенциалом междислокационного взаимодействия. Это позволило свести задачу к локальной пространственно-временной форме и получить самосогласованные эволюционные уравнения динамики дислокаций с учетом их корреляционного взаимодействия.

В настоящей работе на основе этих уравнений проводится последовательный анализ роли корреляционного взаимодействия дислокаций в формировании диссипативных дислокационных структур.

## 1. Корреляционная неустойчивость

Задача теоретического исследования закономерностей формирования дислокационных структур может быть сформулирована на основе системы нелинейных эволюционных уравнений для плотности непрерывно распределенных дислокаций  $\rho_a(\mathbf{r}, t)$  (индекс  $a$  различает дислокации по их принадлежности к определенной системе скольжения  $\alpha$  и направлению вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$  по отношению к единичному вектору  $\mathbf{l}$ , касательному к линии дислокации) [4,24]. В рамках изотропной модели [22] и с учетом эффекта корреляционного взаимодействия дислокаций эволюционные уравнения для суммарной плотности дислокаций  $\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_a \rho_a(\mathbf{r}, t)$  принимают вид [23,25]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{J} + \mathbf{J}_{\text{corr}}) = F(\rho), \quad (1)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -D_f \nabla \rho(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

$$\mathbf{J}_{\text{corr}}(\mathbf{r}, t) = M \rho(\mathbf{r}, t) (A_1 + \Delta A_2 + \dots) \nabla \rho(\mathbf{r}, t). \quad (3)$$

Здесь  $\mathbf{J}$  — эффективный диффузионный поток, обусловленный интенсивной релаксацией дислокационных зарядов вследствие упругого взаимодействия винтовых дислокаций [22],  $\mathbf{J}_{\text{corr}}$  — корреляционный поток, обусловленный взаимодействием флуктуаций упругого поля дислокаций,  $D_f = V^2 / M G b^2 \rho_0$  — эффективный коэффициент диффузии,  $M = V / \eta b \sigma_{\text{ext}}$  — подвижность дислокаций,  $\sigma_{\text{ext}}$  — напряжение течения,  $V$  — стационарная скорость движения дислокаций,  $A_1 = G b^2 / 4 \pi \rho_0$ ,  $A_2 = G b^2 r_D^2 / 8 \pi \rho_0$ ,  $r_D \sqrt{T_{\text{ext}} / G b^2 \rho_0}$  — радиус экранирования упругого поля дислокаций (радиус корреляции),

$T_{\text{ext}} = \eta b \sigma_{\text{ext}} \bar{L}$  — энергия деформации,  $\bar{L}$  — длина свободного пробега дислокаций,  $\eta = kT / \Gamma \sigma_{\text{ext}}$  — термоактивационный параметр,  $\Gamma$  — активационный объем.

Отметим, что при изотропном рассмотрении первичной величиной по отношению к эволюции дислокационных зарядов становится вектор  $\mathbf{J}$ , а не скалярная величина  $I = \sum_a (b_a / b) \rho_a$ , характеризующая избыточную плотность дислокаций в кристалле. (Это аналогично ситуации в континуальной теории дислокаций, когда первичное значение при построении теории приобретает тензор дисторсии вместо вектора смещения точек среды [24].) В этом случае направление вектора  $\mathbf{J}$  определяется не скоростью дислокаций (как при одиночном скольжении), а направлением волнового вектора (или комбинацией волновых векторов с соответствующим весом).

Указанное обстоятельство будет использовано в дальнейшем.

Система (1)–(3) имеет стационарное однородное решение  $\rho = \rho_0$ , которое находится из условия равенства нулю правой части уравнения (1). Соответствующую зависимость  $F(\rho)$  выберем в наиболее характерном виде

$$F(\rho) = \delta \rho - \varkappa \rho^2 - c \rho^3, \quad (4)$$

где  $\delta$  — коэффициент размножения дислокаций по механизму двойного поперечного скольжения,  $\varkappa \simeq 2hV$  — коэффициент иммобилизации дислокаций ( $h = Gb / 4\pi\sigma_{\text{ext}}$  — радиус захвата разноименных дислокаций в дипольные конфигурации),  $c \simeq h_d / V \varkappa \tau_d$  — коэффициент стопорения дислокаций на винтовых диполях ( $h_d$  — радиус захвата дислокаций винтовыми диполями,  $\tau_d$  — характерное время аннигиляции диполей).

Кубичное слагаемое в (4), ответственное за тройные столкновения, часто не учитывают в дислокационной динамике ввиду его предполагаемой малости и соответственно выполнения условия

$$\mu = c \rho_0 / \varkappa \ll 1. \quad (5)$$

Однако, во-первых, это справедливо лишь при достаточно интенсивной аннигиляции дислокаций в диполях ( $\tau_d \ll 1 / h_d V \rho_0$ ), и, во-вторых, как будет показано далее, даже незначительный вклад, который вносит кубичное слагаемое  $c \rho^3$  в эволюцию системы, является принципиальным при формировании дислокационных структур. Заметим, что учет возможного механизма стопорения винтовых дислокаций краевыми диполями, например в рамках перегибной модели [1], приводит к некоторой перенормировке коэффициента  $\varkappa$ . (Данный механизм дает квадратичную зависимость по  $\rho$ , так как плотность краевых диполей  $\rho_d \sim \rho$  [1].)

С учетом вышесказанного и условия  $F(\rho) = 0$  находим стационарное однородное решение

$$\rho_0 = \frac{\sqrt{\varkappa^2 + 4c\delta} - \varkappa}{2c} \simeq \frac{\delta}{\varkappa}. \quad (6)$$

Приближенное равенство в (6) справедливо при  $4c\delta / \varkappa^2 \ll 1$  (или  $\mu \ll 1/4$ ).

Исследуем состояние равновесия (6) на устойчивость. Подставляя  $\mathbf{J}$  и  $\mathbf{J}_{\text{сост}}$  в (1), для переменной

$$\varrho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) - \rho_0, \quad (7)$$

характеризующей отклонение плотности дислокаций от стационарного значения, имеем следующее нелинейное уравнение:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + L(\Delta)\varrho + M\varrho(A_1 + \Delta A_2)\nabla\varrho + \varkappa_0\varrho^2 + c\varrho^3 = 0, \quad (8)$$

где  $L(\Delta) = A_2M\rho_0\Delta^2 + (A_1M\rho_0 - D_f)\Delta + \tau^{-1}$  — линейный оператор,  $\tau = (\varkappa\rho_0 + 2c\rho_0^2)^{-1}$  — характерное время релаксации к стационарному состоянию  $\rho_0$ ,  $\varkappa_0 = \varkappa + 3c\rho_0$ .

Линеаризуя уравнение (8) в окрестности однородного решения  $\varrho(\mathbf{r}) = 0$  и подставляя в линеаризованную систему решение вида  $\varrho \sim \exp(\lambda t + i\mathbf{k}\mathbf{r})$ , получаем дисперсионное уравнение

$$\lambda + L(k^2) = 0,$$

из которого следует, что неустойчивость однородного состояния ( $\lambda > 0$ ) возможна, если

$$L(k^2) = A_2M\rho_0k^4 - (A_1M\rho_0 - D_f)k^2 + \tau^{-1} < 0. \quad (9)$$

Отметим, что данная неустойчивость обусловлена исключительно корреляционным взаимодействием дислокаций, так как при  $A_1 = A_2 = 0$  всегда  $L(k^2) > 0$ .

Анализ неравенства (9) показывает, что оно выполняется, если плотность дислокаций  $\rho_0$  превышает некоторую критическую величину

$$\rho_0 > \rho_c = \frac{8\pi}{(\sqrt{3} - 1)^2 b^2} \left( \frac{kT}{\Gamma G} \right)^2. \quad (10)$$

Условие (10) соответствует при типичных значениях параметров системы ( $T = 300$  К,  $\Gamma = 40b^3$ ,  $b = 3 \cdot 10^{-8}$  см,  $G = 3 \cdot 10^{10}$  Па) критической плотности дислокаций  $\rho \sim 10^9$  см $^{-2}$ , при достижении которой в локальном объеме происходит зарождение неоднородных дислокационных структур.

Как следует из неравенства (9), ДС-неустойчивость имеет пороговый характер и реализуется в интервале волновых чисел  $|\mathbf{k}| \in (k_1, k_2)$ , где

$$k_{1,2}^2 = k_c^2 \pm \sqrt{k_c^4 - (A_2M\rho_0\tau)^{-1}}, \quad k_c^2 = \frac{A_1M\rho_0 - D_f}{2A_2M\rho_0}. \quad (11)$$

В окрестности точки бифуркации ( $\rho_0 \sim \rho_c$ ,  $|\mathbf{k}| = k_c$ ) происходит спонтанный рост флуктуаций плотности дислокаций с характерным пространственным масштабом

$$\Lambda_c = \frac{2\pi}{k_c} \simeq \frac{(2\pi)^{3/4}}{4} \sqrt{\bar{L}\bar{r}}. \quad (12)$$

Здесь  $\bar{L} = \tau V = (h\rho_0)^{-1}$  — длина свободного пробега дислокации (длина релаксации),  $\bar{r} = \rho_0^{-1/2}$  — среднее расстояние между дислокациями. Если учесть, что  $h = Gb/4\pi\sigma_{\text{ext}}$  и  $\sigma_{\text{ext}} \simeq Gb\alpha_f\sqrt{\rho_0}$  [1,4], то  $h = \bar{r}/4\pi\alpha_f$ , и соответственно выражение (12) принимает вид

$$\Lambda_c = K\rho^{-1/2}, \quad (13)$$

где  $K = \sqrt{\alpha_f}(2\pi)^{5/4}$ . При типичных значениях параметра  $\alpha_f = 0.3-2$  величина  $K$  принимает значения  $K \simeq 6-15$ .

Сопоставим эти результаты с экспериментальными данными. Так, в работе [26] было установлено, что при испытаниях поликристаллической меди с постоянной скоростью растяжения материала размер ячеек в дислокационной структуре связан с плотностью дислокаций зависимостью (13), причем величина  $K \simeq 16.7$ . В работе [27] при испытаниях никеля импульсным воздействием значение величины  $K$  по мере увеличения амплитуды импульса (10–46 ГПа) изменялось в пределах  $K = 10-12$ . Таким образом, рассматриваемая модель в этой части удовлетворительно описывает экспериментальные результаты.

## 2. Кристаллические и квазикристаллические дислокационные структуры

Полученные на линейной стадии исследования результаты не позволяют выяснить характер эволюции дислокационного ансамбля за точкой бифуркации, поэтому необходимо исследовать полные нелинейные уравнения. Исследование динамики ансамбля дислокаций будем проводить в двумерной области  $\Omega = L_1L_2$  с учетом наложенных на уравнение (8) периодических граничных условий

$$\varrho(\mathbf{r}, t) = \varrho(\mathbf{r} + \mathbf{L}, t), \quad (14)$$

где  $\mathbf{L} = L_1\mathbf{e}_x + L_2\mathbf{e}_y$  — вектор трансляции. Естественно предположить, что  $L_1$  и  $L_2$  имеют характерный масштаб порядка размера зерна для поликристаллов и порядка размера образца для монокристаллов.

Как показывает исследование подобных систем [7,8], в том случае, когда термодинамическая ветвь системы претерпевает бифуркацию, поведение системы в окрестности точки неустойчивости определяется набором незапускающих коллективных переменных (мод), называемых параметрами порядка [7]. Следуя этой логике, представим искомое решение уравнения (8) в виде

$$\varrho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) - \rho_0 = \sum_{\mathbf{k}} [\xi_{\mathbf{k}}(t)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \text{c.c.}]. \quad (15)$$

В разложении (15) коллективные переменные  $\xi_{\mathbf{k}}(t)$  — неизвестные пока функции времени,  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$  — ортогональные собственные функции оператора  $L(\Delta)$ ,

а волновой вектор  $\mathbf{k}$  с учетом граничных условий (14) принимает дискретные значения

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} = 2\pi \begin{pmatrix} n_1/L_1 \\ n_2/L_2 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

где  $n_{1,2}$  — целые числа.

Используя разложение (15) и учитывая сделанные выше замечания относительно эволюции дислокационных зарядов, можно построить выражение для избыточной плотности дислокаций [22]. Применяя формулу (2), в результате имеем

$$I(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} I_{\mathbf{k}} = -\frac{D_f}{V} \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}| \left[ i\xi_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \text{c.c.} \right]. \quad (17)$$

Подставим разложение (15) для переменной  $\varrho(\mathbf{r}, t)$  в уравнение (8), используя ортогональность функции  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$(\psi_{\mathbf{k}}, \psi_{\mathbf{k}'}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})dxdy = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (18)$$

В результате получаем резонансные уравнения для параметров порядка  $\xi_{\mathbf{k}}(t)$ , которые при условии слабой надкритичности ( $\rho_0 \sim \rho_c$ ,  $|\mathbf{k} \sim k_c|$ ) принимают следующий вид:

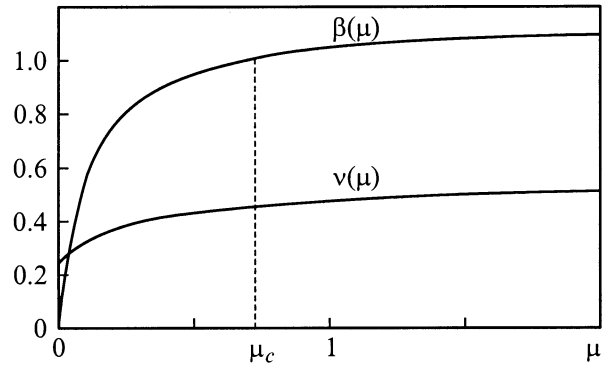
$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial t} = & \lambda_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}} - B_1 \sum_{|\mathbf{k}'|=k_c} \xi_{\mathbf{k}} \left( 1 - \frac{\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}}{2} \right) |\xi_{\mathbf{k}'}|^2 \\ & - B_2 \xi_{\mathbf{k}}^* \xi_{2\mathbf{k}} - B_3 \sum_{|\mathbf{k}'|, |\mathbf{k}''|=k_c} \xi_{\mathbf{k}'} \xi_{\mathbf{k}''} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'+\mathbf{k}''}, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\frac{\partial \xi_{2\mathbf{k}}}{\partial t} = \lambda_{2\mathbf{k}}\xi_{2\mathbf{k}} + B_4 \xi_{\mathbf{k}}^2. \quad (20)$$

Здесь  $B_1 = 6c$ ,  $B_2 = 2\kappa_0 + 9(2 - \sqrt{3})/\tau\rho_0$ ,  $B_3 = 2\kappa_0 + \sqrt{3}/\tau\rho_0$ ,  $B_4 = \kappa_0(2\sqrt{3} - 1)$ ,  $\lambda_{\mathbf{k}} = -L(k) \simeq \varepsilon/\tau - \gamma_0(k^2 - k_c^2)^2$ ,  $\varepsilon = \rho_0/\rho_c - 1$ ,  $\gamma_0 = A_2 M \rho_0$ ,  $\lambda_{2\mathbf{k}} = -L(2k_c) = -9/\tau$ . Переменные  $\xi_{2\mathbf{k}}$  являются затухающими, однако их учет в эволюции системы необходим, так как они эффективно стабилизируют поведение нарастающих мод  $\xi_{\mathbf{k}}$ .

В представлении (19), (20) учтены лишь квадратичные и кубические по  $\xi_{\mathbf{k}}$  слагаемые, которые при  $B = B_1/2 - B_2 B_4/\lambda_{2\mathbf{k}} > 0$  (что имеет место в нашем случае) определяют поведение системы в условиях слабой надкритичности. В противном случае ( $B < 0$ ) необходим учет высших членов, появляющихся в системе при учете эволюции субгармоник  $\xi_{s\mathbf{k}}$  ( $s = 3, 4, 5, \dots$ ).

Система (19), (20) допускает большой спектр возможных стационарных решений, определив которые, можно по формуле (15) построить решения для исходной переменной  $\rho(\mathbf{r}, t)$ . Далее ограничимся изучением структур, для которых векторы  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_n$  по модулю равны  $k_c$ , а угол между двумя соседними векторами  $\mathbf{k}_n$  и  $\mathbf{k}_{n+1}$  при  $N \geq 2$  одинаков и равен  $\pi/N$ . Здесь  $N$  — некоторое фиксированное целое число, определяющее число возбужденных мод ( $n = 1, 2, \dots, 2N$ ).



**Рис. 1.** Графики зависимостей  $\beta = \beta(\mu)$  и  $\nu = \nu(\mu)$  параметров, ответственных за нелинейную конкуренцию мод. Бифуркационному значению  $\beta = 1$  соответствует критическое значение  $\mu_c = 0.726$ .

Структуры, определяемые (15) при стационарных значениях параметров порядка, имеют различный тип симметрии при разных  $N$ . Далее ограничимся рассмотрением случаев  $N \leq 5$ .

Преобразуем систему (19), (20) к безразмерному виду, полагая

$$\xi_{\mathbf{k}_n} = \rho_0 A_n e^{i\varphi_n}, \quad \xi_{2\mathbf{k}_n} = \rho_0 C_n e^{2i\varphi_n}, \quad t' = t/\tau. \quad (21)$$

Здесь  $A_{n+N} = A_n$ ,  $C_{n+N} = C_n$ ,  $\varphi_{n+N} = -\varphi_n$ ,  $\mathbf{k}_{n+N} = -\mathbf{k}_n$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$ . В результате имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_n}{\partial t'} = & \left[ \varepsilon - \gamma_1 A_n^2 - 2\gamma_1 \sum_{k \neq n}^N A_k^2 \right] A_n \\ & - \gamma_2 A_n C_n - \delta_{3,N} \gamma_3 A_{n+1} A_{n-1} \cos \Psi_n, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\frac{\partial C_n}{\partial t'} = -9C_n + \gamma_4 A_n^2, \quad (23)$$

$$A_n \frac{\partial \varphi_n}{\partial t'} = -\delta_{3,N} \gamma_3 A_{n+1} A_{n-1} \sin \Psi_n, \quad (24)$$

где  $\Psi_n = \varphi_{n+1} + \varphi_{n-1} - \varphi_n$ ,  $\gamma_1 = 6\mu/(1 + 2\mu)$ ,  $\gamma_2 = 2\gamma + 9(2 - \sqrt{3})$ ,  $\gamma_3 = 2\gamma - \sqrt{3}$ ,  $\gamma_4 = \gamma(2\sqrt{3} - 1)$ ,  $\gamma = (1 + 3\mu)/(1 + 2\mu)$ ,  $\delta_{3,N}$  — символ Кронекера.

Система (22)–(24) имеет помимо тривиального стационарного решения  $A_n = C_n = 0$ ,  $\varphi_n = \text{const}$ , не устойчивого при  $\varepsilon > 0$ , множество других стационарных решений. Их число зависит от величины  $N$ , а устойчивость контролируется параметром надкритичности  $\varepsilon$  и параметрами нелинейного взаимодействия мод

$$\beta = 18\gamma_1/(9\gamma_1 + \gamma_2\gamma_4), \quad \nu = \gamma_3(\gamma_1 + \gamma_2\gamma_4/9)^{-1/2}. \quad (25)$$

Параметры  $\beta$  и  $\nu$  однозначно зависят от параметра  $\mu$ . Графики зависимостей  $\beta = \beta(\mu)$ ,  $\nu = \nu(\mu)$  показаны на рис. 1.

Анализ показывает, что устойчивыми могут быть два типа решений. Это одномодовые

$$A_1 = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\beta_1}}, \quad A_2 = A_3 = \dots = A_N = 0, \quad (26)$$

и симметричные многомодовые конфигурации

$$A_1 = A_2 = \dots = A_N = \sqrt{\varepsilon/\beta_N}, \quad N \neq 3, \quad (27)$$

$$A_1 = A_2 = A_3 = (-1)^{m+1} \frac{\gamma_3 + \sqrt{\gamma_3^2 + 4\beta_3\varepsilon}}{2\beta_3}, \quad N = 3, \quad (28)$$

где  $\beta_N = \gamma_1(2N - 1) + \gamma_2\gamma_4/9$ . Стационарное значение  $C_n$  во всех случаях выражается через  $A_n$  следующим образом:

$$C_n = \gamma_4 A_n^2 / 9. \quad (29)$$

В случае  $N = 3$  фазы синхронизированы и удовлетворяют условию  $\Psi_n = \pi m$  ( $m$  — целое число). При  $N \neq 3$  фазы произвольны ( $\varphi_n = \text{const}$ ).

Стационарному решению (26) отвечает периодическая одномерная структура, которая в случае  $N = 1$  в области ДС-неустойчивости ( $\varepsilon > 0$ ) является устойчивой при любых значениях параметров. При  $N \geq 2$  она устойчива только в случае  $\beta > 1$ . При этом другие конфигурации, за исключением трехмодовой, неустойчивы.

При  $\beta < 1$  устойчивыми являются многомодовые ячеистые структуры: ромбическая ( $N = 2$ ), гексагональная ( $N = 3$ ), октагональная ( $N = 4$ ) и декагональная ( $N = 5$ ). Эти структуры для суммарной плотности  $\rho(\mathbf{r}, t)$  получаются подстановкой (26), (27) или (28) с учетом (29) в (21) и (15)

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^N [A_n \cos(\mathbf{k}_n \mathbf{r} + \varphi_n) + C_n \cos 2(\mathbf{k}_n \mathbf{r} + \varphi_n)] \right\}. \quad (30)$$

Соответствующие структуры для избыточной плотности дислокаций  $I(\mathbf{r}, t)$  с учетом (17) имеют вид

$$I(\mathbf{r}) = E_{\max} \sum_{n=1}^N [A_n \sin(\mathbf{k}_n \mathbf{r} + \varphi_n) + C_n \sin 2(\mathbf{k}_n \mathbf{r} + \varphi_n)], \quad (31)$$

где  $I_{\max} = 2\rho_0 D_f k_c / V$  — максимальное значение избыточной плотности дислокаций.

Образующиеся структуры (30), (31) при  $N \leq 3$  являются структурами кристаллического типа (рис. 2 и 3, *b*), а при  $N \geq 4$  — квазикристаллическими структурами, обладающими элементами локальной симметрии (рис. 4).

Режим возбуждения всех структур (за исключением гексагональной) является мягким ( $A_n \sim \sqrt{\varepsilon}$ ). Для гексагональной структуры он жесткий. При достижении точки бифуркации ( $\varepsilon = 0$ ) амплитуда трехмодовой структуры возрастает скачком до величины  $A_c = \nu(1 + 2\beta) / \sqrt{\beta_1}$  (рис. 3, *a*). Для этого случая имеет место гистерезис: при уменьшении  $\varepsilon$  устойчивость гексагональной структуры

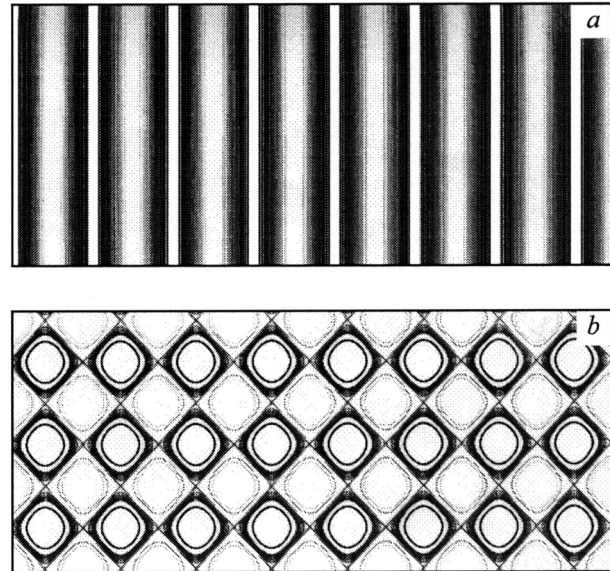


Рис. 2. Маломодовые структуры кристаллического типа, формирующиеся в системе (1)–(3) в режиме мягкого возбуждения, согласно решениям (30), (31). *a* — одномерная периодическая структура, изображенная линиями равных уровней, *b* — ромбическая структура ( $N = 2$ ).

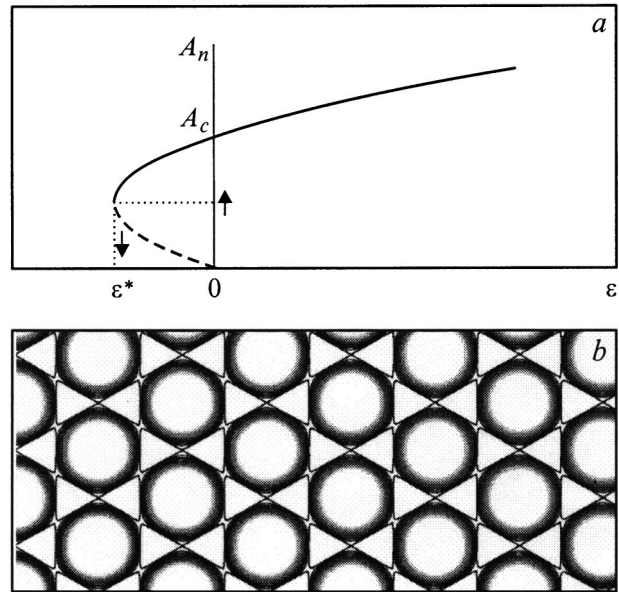
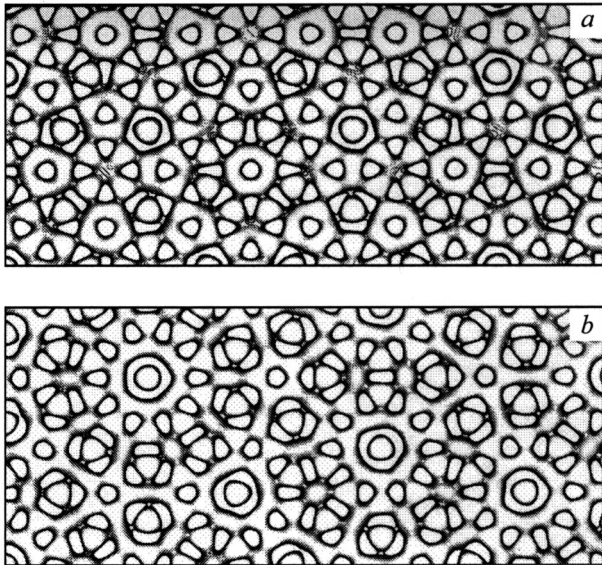


Рис. 3. Формирование гексагональной структуры ( $N = 3$ ) в режиме жесткого возбуждения. *a* — бифуркационная диаграмма  $A_n = A_n(\varepsilon)$  для амплитуд неустойчивых мод (сплошная линия соответствует устойчивой ветви), *b* — вид структуры согласно решениям (30), (31).

сохраняется и в некоторой области  $\varepsilon^* < \varepsilon < 0$  отрицательных значений параметра  $\varepsilon$  ( $\varepsilon^* = -\nu^2/4(1 + 2\beta)$ ). Таким образом, при  $N = 3$  в области значений параметров  $\varepsilon > 3$  и  $\beta > 1$  устойчивыми являются одномодовая и трехмодовая структуры, отвечающие локальным ми-



**Рис. 4.** Квазикристаллические дислокационные структуры, формирующиеся в системе (1)–(3). *a* — октагональная структура ( $N = 4$ ), *b* — декагональная структура ( $N = 5$ ).

нимумам функции Ляпунова  $V$  для системы (22)–(24). Анализ показывает, что минимум  $V$  для гексагональной структуры является более глубоким, поэтому при учете флуктуаций вероятность реализации этой конфигурации более высока.

Как следует из (30), (31), при  $N = 4$  и 5 наряду с симметрией дальнего порядка появляется новый тип локальной симметрии относительно поворота вокруг оси, не совместимый с трансляционной инвариантностью. Именно этот тип симметрии обеспечивает квазикристаллическость формируемых дислокационных структур. Анализ случаев при  $N > 5$  в данной работе не проводился, однако заметим, что, как показывают исследования подобных систем [14,28], при увеличении  $N$  "квазикристаллические свойства" структур усиливаются, при  $N \rightarrow \infty$  система стремится в состояние "турбулентного кристалла" [14].

Квазикристаллические структуры являются устойчивыми при  $\beta < 1$  или  $\mu < \mu_c = 0.726$  (рис. 1). Отметим, что используемые довольно часто в теории самоорганизации реакционно-диффузионные модели [7,8] дают параметр нелинейного взаимодействия  $\beta > 1$  (в модели Свифта–Хоенберга  $\beta = 2$  [14]). Поэтому в рамках этих моделей квазикристаллические структуры (как и ромбические) не возникают: они неустойчивы.

Возможность в рассматриваемой модели для параметра  $\beta$  принимать значение, меньшее единицы, связана с наличием в исходной системе (1)–(3) нелинейных градиентных слагаемых, ответственных за корреляционное взаимодействие дислокаций. С математической точки зрения эти градиентные слагаемые уменьшают коэффициенты нелинейного взаимодействия конкурирующих мод, создавая условия для их независимой динами-

ки. Именно поэтому симметричные ячеистые состояния являются наиболее устойчивыми при  $\beta < 1$ .

Таким образом, учет корреляционного взаимодействия в системе эволюционных уравнений позволяет объяснить возникновение различных типов диссипативных дислокационных структур, в том числе с симметрией квазикристалла.

Рассмотрим с позиций данной работы закономерности формирования неоднородных дислокационных структур и возможные этапы их эволюции.

На начальных стадиях пластической деформации, при плотности дислокаций, меньшей некоторого критического значения ( $\rho_0 < \rho_c$ ), распределение дислокаций является однородным. При  $\rho_0 = \rho_c$  в системе развивается ДС-неустойчивость, сопровождающаяся зарождением неоднородных дислокационных структур. Оценки  $\rho_c$  показывают, что критическое значение плотности соответствует второй стадии пластической деформации ( $\rho_c \sim 10^9 \text{ см}^{-2}$ ). Вид образующихся диссипативных структур в области ДС-неустойчивости ( $\rho_c > \rho_0$ ) зависит от числа возбуждаемых неустойчивых мод ( $2N$ ) и параметра  $\beta = \beta(\mu)$ , ответственного за конкуренцию этих мод. В рамках рассматриваемой изотропной модели значение  $N$  произвольно. В более реальной анизотропной модели число  $N$  должно зависеть от числа возбуждаемых систем скольжения  $\alpha$ . Поэтому можно предположить, что с ростом деформации существует тенденция к увеличению  $N$ . В этой ситуации в зависимости от значения параметра  $\beta$  (или  $\mu$ ) возможны две цепочки превращений структур при увеличении  $N$ : одномерная периодическая  $\rightarrow$  гексагональная ячеистая (при  $\mu > \mu_c$ ); одномерная  $\rightarrow$  ромбическая  $\rightarrow$  гексагональная  $\rightarrow$  октагональная  $\rightarrow$  декагональная (при  $\mu < \mu_c$ ).

Интересно заметить, что две цепочки превращений дислокационных структур с ростом деформации были обнаружены в экспериментальных работах при исследовании ГЦК-сплавов [15] (хотя и для несколько иных типов структур). Физически условие  $\mu < \mu_c$  (см. неравенство (5)) характеризует малость кубических слагаемых по отношению к квадратичным, что имеет место при заданных механизмах локальной кинетики дислокаций в условиях малого времени жизни диполей винтовых дислокаций. Обычно процессы интенсивной аннигиляции дислокаций в диполях начинаются с наступлением третьей стадии деформации; эти процессы обусловлены активизацией поперечного скольжения винтовых дислокаций [2]. Поэтому формирования квазикристаллических дислокационных структур следует ожидать именно на этой стадии пластической деформации.

Возникающие в процессе пластической деформации кристалла диссипативные дислокационные структуры являются неравновесными. При снятии нагрузки они должны релаксировать в однородное состояние. Однако релаксация имеет неполный характер, так как в максимумах пространственной дислокационной структуры (формирующих в дальнейшем стенки ячеек) должны образовываться квазиравновесные дипольные (мультипольные)

конфигурации, состоящие из дислокаций разного знака и повторяющиеся в целом геометрию диссипативной структуры. Такая квазиравновесная структура при снятии нагрузки может не иметь строгой периодичности и, более того, быть незавершенной. Экспериментально замечено, что завершение формирования ячеек (замыкание границ) происходит к началу третьей стадии пластической деформации [2,15]. Одновременно с наступлением третьей стадии обычно наблюдается увеличение дислокационного заряда в дислокационных ячейках, а также возникновение субграниц. Можно предположить, что поперечное скольжение винтовых компонент дислокаций, имеющих пороги, вызывает интенсивный рост точечных дефектов (вакансий и междоузельных атомов). Точечные дефекты в свою очередь инициируют процессы полигонизации в наиболее "слабых" местах, а именно в максимумах избыточной плотности дислокаций диссипативной структуры (сформированной, например, по рассмотренному в настоящей работе сценарию). В результате в теле дислокационных ячеек образуются разориентированные фрагменты типа равновесных стенок, представляющие собой "зародыши" субграниц.

## Список литературы

- [1] Б.И. Смирнов. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Наука, Л. (1981). 275с.
- [2] В.И. Трефилов, В.Ф. Моисеев, Э.П. Печковский и др. Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических материалов. Наук. думка, Киев (1987). 245 с.
- [3] Кооперативные деформационные процессы и локализация деформации. Наук. думка, Киев (1989). 320 с.
- [4] Г.А. Малыгин. ФТТ **37**, 1, 3 (1995).
- [5] В.С. Иванова, А.С. Баланкин, И.Ж. Бунин, А.А. Оксогоев. Синергетика и фракталы в материаловедении. Наука, М. (1994). 383 с.
- [6] В.Е. Панин, В.А. Лихачев, Ю.В. Гриняев. Субструктурные уровни деформации твердых тел. Наука, Новосибирск (1985). 226 с.
- [7] Г. Хакен. Синергетика. Мир, М. (1980). 406 с.
- [8] Г. Николис, И. Пригожин. Самоорганизация в неравновесных системах. Мир, М. (1979). 512 с.
- [9] E.C. Aifantis. Mater. Sci. Eng. **81**, 563 (1986).
- [10] D. Walgraef, E.C. Aifantis. J. Appl. Phys. **58**, 2, 668 (1985).
- [11] J. Kratochvil. Rev. Phys. Appl. **23**, 4, 419 (1988).
- [12] Г.А. Малыгин. ФТТ **31**, 1, 175 (1989).
- [13] И.Л. Максимов, Г.Ф. Сарафанов. Письма в ЖЭТФ **61**, 5, 405 (1995).
- [14] М.И. Рабинович, А.Б. Езерский. Динамическая теория формообразования. Янус-К, М. (1998). 192 с.
- [15] Н.А. Конева, Э.В. Козлов. Изв. вузов. Физика **2**, 87 (1990).
- [16] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Физическая кинетика. Наука, М. (1979). 528 с.
- [17] Ю.Л. Климонтович. Статистическая физика. Наука, М. (1982). 608 с.
- [18] E.A. Mareev, G.F. Sarafanov. Phys. Plasm. **5**, 5, 1563 (1998).
- [19] D.L. Holt. J. Appl. Phys. **41**, 3197 (1970).
- [20] Ш.Х. Ханнанов. ФММ **10**, 34 (1992).
- [21] Ш.Х. Ханнанов. ФММ **2**, 31 (1994).

- [22] Г.Ф. Сарафанов, И.Л. Максимов. ФТТ **39**, 6, 1066 (1997).
- [23] Г.Ф. Сарафанов. ФТТ **39**, 9, 1575 (1997).
- [24] А.М. Косевич. Дислокации в теории упругости. Наук. думка, Киев (1978). 220 с.
- [25] G.F. Sarafanov, I.L. Maksimov, Yu.G. Shondin. XX<sup>th</sup> Int. Iupap. Conf. in Statistical Physics. Paris (July 20–24, 1998). Abstracts. P. 10.
- [26] M.R. Staker. D.L. Holt. Acta. Met. Mater. **20**, 576 (1972).
- [27] Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов. Металлургия, М. (1984). 512 с.
- [28] Б.А. Маломед, А.А. Непомнящий, М.И. Трибельский. ЖЭТФ **96**, 2(8), 684 (1989).