

Дислокационный механизм динамической полигонизации кристаллов при изгибе

© Г.А. Малыгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: malygin.ga@pop.ioffe.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 9 ноября 2001 г.)

Обсуждается теоретически механизм динамической полигонизации кристаллов при одиночном скольжении. Анализ основан на уравнении эволюции плотности геометрически необходимых дислокаций (ГНД), генерируемых при изгибе кристалла. Формирование вертикальных стенок наклона из краевых дислокаций рассматривается как синергетический процесс самоорганизации ГНД. Определены расстояния между стенками и связанная с ними локальная разориентация кристалла.

Возникновение кристаллографически разориентированных областей (блоков, фрагментов) — характерное явление, сопровождающее пластическую деформацию кристаллических материалов. Разориентация областей может быть невелика — составлять несколько угловых минут, а может достигать десятков градусов. Широко изменяется также и средний размер фрагментов: от сотен нанометров до нескольких миллиметров. В целом с ростом величины пластической деформации происходит уменьшение размеров фрагментов и увеличение их взаимной разориентации.

Образование разориентированных объемов в деформируемом кристалле — результат локального или общего упругого изгиба-кручения кристалла в процессе его пластической деформации. Дислокационная релаксация изгибов (их пластическая аккомодация) вызывает появление пластических поворотов локальных объемов кристалла относительно друг друга. Геометрически необходимые дислокации [1], осуществляющие эту аккомодацию, сосредотачиваются обычно в границах фрагментов. Чем выше плотность ГН дислокаций одного знака в границах, тем больше кристаллографическая разориентация соответствующих фрагментов кристалла.

В настоящей работе рассмотрен механизм динамической полигонизации (ДП) кристалла при изгибе, развивающейся на начальной стадии его пластической деформации (на стадии легкого скольжения) при действии преимущественно одной системы скольжения. Результатом ДП является образование вертикальных дислокационных стенок перпендикулярно плоскости скольжения дислокаций [2,3]. В отличие от статической полигонизации (образования в кристалле разориентированной блочной дислокационной структуры при повышенных температурах [4,5]) динамическая полигонизация наблюдается при низких и умеренных температурах. Ее еще называют полигонизацией скольжением, поскольку механизм образования дислокационных стенок не связан с диффузионным переползанием дислокаций, как при статической полигонизации. ДП структура в виде периодической системы дислокационных стенок наклона возникает, например, в областях кристалла, примыкающих к захватам

нагружающего устройства, вследствие изгиба кристалла в этих местах [3].

В начале настоящей работы рассмотрены энергетический и геометрический аспекты формирования таких дислокационных структур. Далее механизм образования ДП структур проанализирован с дислокационно-кинетических позиций, позволяющих установить условия их формирования и расстояния между соседними дислокационными стенками в подобных структурах в зависимости от микроскопических параметров, определяющих эволюцию дислокационного ансамбля в деформируемом кристалле. С кинетических позиций образование динамически полигонизованных структур есть синергетический процесс самоорганизации ГН дислокаций [6].

1. Полигонизация изогнутых кристаллов

При изгибе кристалла ГНД могут быть распределены хаотически (рис. 1, *a*), в виде дислокационных стенок со средним расстоянием между ними Λ (рис. 1, *b*), а также в виде одиночной стенки наклона, в которой сконцентрированы все дислокации (рис. 1, *c*). Распределение дислокаций в виде одиночной стенки соответствует минимуму энергии дислокационного ансамбля.

Действительно, пусть в результате упругого изгиба кристалла в него введена плотность ГНД $\rho = 1/bR$ [7], где b — вектор Бюргерса, R — радиус изгиба кристалла. Тогда общее число дислокаций в кристалле $N = 4\rho Ll_0$, где $2l_0$ — высота кристалла, $2L$ — его ширина. Если дислокации распределены хаотически, энергия дислокационного ансамбля, равная сумме собственных энергий дислокаций и энергии их взаимодействия, описывается выражением [8]

$$E_s = A\rho \ln \frac{1}{r_0\rho^{1/2}}, \quad A = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)}. \quad (1)$$

Здесь μ — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, r_0 — эффективный радиус ядра дислокации. При распределении дислокаций в виде системы $n = 2L/\Lambda$

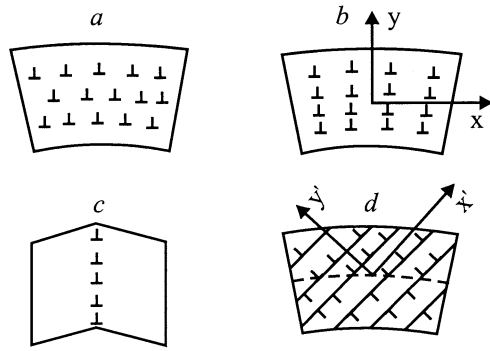


Рис. 1. Распределение виртуальных (a-c) и реальных (d) дислокаций в изогнутых кристаллах.

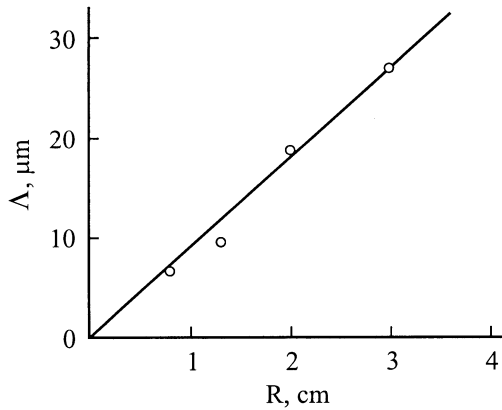


Рис. 2. Зависимость расстояний между дислокационными стенками Λ от радиуса изгиба R кристалла Zn, построенная по данным [2].

вертикальных стенок (рис. 1, b) или в виде одиночной стенки наклона (рис. 1, c) энергии будут соответственно равны

$$E_n = A\rho \ln \frac{h_n}{r_0}, \quad E_l = A\rho \ln \frac{h_l}{r_0}, \quad (2)$$

где h_n и h_l — расстояния между дислокациями в стенках и в одиночной стенке.

В результате с учетом равенств $\rho = (h_n\Lambda)^{-1} = (2h_lL)^{-1}$ находим для разницы энергий трех состояний ансамбля выражения

$$E_s - E_n = \frac{1}{2} A\rho \ln \frac{\Lambda}{h_n} > 0,$$

$$E_n - E_l = \frac{1}{2} A\rho \ln \frac{2L}{\Lambda} > 0. \quad (3)$$

Из них следует, что энергии рассматриваемых ансамблей уменьшаются в последовательности $E_s > E_n > E_l$, т.е. распределение дислокаций в виде одиночной стенки соответствует минимуму энергии. Как видно из (1) и (2), это является результатом уменьшения энергии взаимодействия дислокаций вследствие уменьшения радиусов их взаимодействия в последовательности

$\rho^{-1/2} > h_n > h_l$. Разориентации соответствующих фрагментов кристалла увеличиваются в обратной последовательности $\omega_s < \omega_n < \omega_l$. Здесь $\omega_s = b\rho^{1/2}$, $\omega_n = b/h_n$, $\omega_l = b/h_l$.

При изгибе упругая деформация кристалла равна $\varepsilon = y/R = \omega$, где ω — угол изгиба, y — расстояние от нейтральной оси (рис. 1, a). Исключая из приведенного соотношения $R^{-1} = b\rho$, получаем соотношение между деформацией, углом изгиба и плотностью ГНД $\varepsilon = \omega = b\rho y$. Оно имеет вид соотношения для величины пластической деформации, пропорциональной плотности дислокаций и длине их пробега y . Реальные, невиртуальные ГНД располагаются в плоскостях скольжения (рис. 1, d). Поэтому при пластической релаксации изгиба (рис. 1, d) сдвиговая деформация равна $\gamma_p = \varepsilon/m = b\rho x'$, где m — ориентационный фактор плоскостей скольжения, x' — свободный пробег дислокаций в них. Полагая, что пробег дислокаций в среднем равен $l = x' = l_0/2m$, получаем соотношение Эшби [1] между плотностью дислокаций и величиной пластической деформации для ГН дислокаций $\rho = \gamma_p/bl$. Здесь $l \sim l_0$ характеризует размер области изгиба. Средняя величина пластической разориентации кристалла при этом равна $\omega_p = \gamma_p = b\rho l = l/R$.

При локализации пластического изгиба в виде системы вертикальных дислокационных стенок со средним расстоянием между ними Λ (рис. 1, b и d) среднее расстояние пробега дислокаций равно Λ и, следовательно, связанная с образованием каждой стенки локальная разориентация кристалла равна $\omega_n = b/h_n = b\rho\Lambda = \Lambda/R$, поскольку $\rho = 1/h_n\Lambda$. На рис. 2 приведена построенная по данным [2] экспериментальная зависимость между Λ и радиусом изгиба R кристалла Zn. Линейный характер этой зависимости указывает, что разориентация кристалла ω_n , связанная с образованием стенок наклона, и плотность дислокаций в стенках остаются постоянными при разных Λ и R . Величина угла ω_n и расстояние между дислокациями в стенке h_n определяются, очевидно, не только геометрическими и энергетическими факторами. Далее будет показано, что они определяются в основном кинетическими факторами.

2. Уравнение эволюции ГНД

Приведенные выше энергетические и геометрические оценки указывают, в каком направлении должен эволюционировать ансамбль ГН дислокаций. Но, как уже было сказано, они не позволяют определить параметры образующихся полигонизованных структур. Кроме того, указанные оценки не принимают во внимание структуру кристалла, влияющую на подвижность дислокаций. Подвижность дислокаций понимается в широком смысле: не только как скорость перемещения дислокаций, но и как их иммобилизация на непреодолимых препятствиях, в результате чего иммобилизованные дислокации оказываются неспособными участвовать в процессе перераспределения дислокаций в кристалле.

Согласно кинетическому механизму пространственно-временная эволюция плотности ГНД определяется кинетическим уравнением вида [9–12]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} \right) = S(\rho), \quad (4)$$

где J_x и J_y — дислокационные потоки соответственно в плоскости скольжения дислокаций и в поперечном к ней направлении, $S(\rho)$ — слагаемое, описывающее скорость генерации дислокаций и их иммобилизацию и аннигиляцию, t — время. Согласно соотношению Эшби, скорость генерации ГНД $\dot{\rho} = \dot{\gamma}/bl = (u/l)\rho$, поскольку $\dot{\gamma} = b\rho u$, u — скорость дислокаций. В результате с учетом того, что при динамической полигонизации $J_y = 0$, получаем

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} = \frac{u}{l}\rho - h_d u \rho^2. \quad (5)$$

Второе слагаемое в правой части (5) описывает процесс иммобилизации дислокаций в результате образования диполя из краевых дислокаций одного знака, h_d — расстояние между параллельными плоскостями скольжения для образования диполя (радиус захвата).

Возникновение пространственно неоднородных потоков $J_x(x)$ может быть обусловлено неравномерным расположением ГНД вдоль плоскостей скольжения и связанными с этим дальнедействующими напряжениями [8,9]

$$\tau_d(x, t) = A \int \frac{\rho(x', t)}{x' - x} dx' \approx A \left(2R_0 \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{1}{9} R_0^3 \frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3} + \dots \right), \quad (6)$$

где $R_0 \approx \rho^{-1/2}$ — радиус обрезания при локальном взаимодействии дислокаций. В случае термоактивированного движения дислокаций нелокальный диффузионный поток дислокаций равен $J_x^{\text{df}} = u\rho [(\partial \ln u / \partial \tau)_{\tau_d=0}] \tau_d$, $\partial \ln u / \partial \tau = V/kT$, V — активационный объем, T — температура. Предполагается, что $\tau_d \ll \tau$, где τ — напряжение, связанное с изгибом кристалла. В результате с учетом дрейфовой составляющей потока дислокаций $J_x^{\text{dr}} = u\rho$ получаем после подстановки полного потока в (5) следующее уравнение эволюции плотности ГНД:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \left(\frac{2VA}{kT} \right) u \frac{\partial}{\partial x} \left(\sqrt{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{1}{9\rho^{1/2}} \frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3} \right) \\ = \frac{u}{l}\rho - h_d u \rho^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Линейный анализ уравнения (7) показывает, что вблизи критических точек $\rho_1 = 0$ и $\rho_2 = 1/h_d l$ устойчивость плотности дислокаций к флуктуациям вида $\exp(\omega t + i q x)$ определяется уравнением $\omega(q) = \omega_1(q) + i\omega_2(q)$, где

$$\begin{aligned} \omega_1(q) = u \left[\frac{1}{l} - 2h_d \rho_{1,2} + \frac{VA}{kT} \rho_{1,2}^{1/2} \left(2q^2 - \frac{1}{9\rho_{1,2}} q^4 \right) \right], \\ \omega_2 = uq. \end{aligned} \quad (8)$$

Условие $\partial \omega_1 / \partial q = 0$ определяет критическое значение волнового вектора $q_{1,2} = 3\rho_{1,2}^{1/2}$. Критические частоты при этом равны

$$\omega_1(q_1) = u/l > 0,$$

$$\omega_1(q_2) = \frac{u}{l} \left[9 \left(\frac{VA}{kT} \right) \frac{1}{h_d} \left(\frac{1}{h_d l} \right)^{1/2} - 1 \right]. \quad (9)$$

Из найденных соотношений следует, во-первых, что флуктуации плотности конвективно неустойчивы. Во-вторых, исходная нулевая плотность ГНД неустойчива к длинноволновым флуктуациям $\lambda_1 = 2\pi/q_1 \rightarrow \infty$, а равновесная плотность дислокаций ρ_2 устойчива к флуктуациям $\lambda_2 = (2\pi/3)(h_d l)^{1/2}$ при условии $\omega_1(q_2) < 0$, т.е. в достаточно толстых ($l > l_c$) кристаллах. Оценка показывает, что при $\mu V / 2\pi(1-\nu)kT = 5 \cdot 10^3$, $h_d/b = 5$, $b = 0.3$ nm величина $l_c \approx 0.3$ mm.

3. Кинетика полигонизации

Уравнение эволюции плотности ГНД (5) в общем случае является нелинейным интегро-дифференциальным уравнением. Выше было использовано дифференциальное разложение интеграла (6), в результате чего уравнение эволюции приобрело чисто дифференциальную форму (7). В настоящем разделе рассмотрено решение этого приближенного уравнения с учетом только первого градиентного члена в круглой скобке. В результате будет найдена динамика (кинетика) формирования полигонизованной структуры и ее параметры.

Решение уравнения (7) ищем в виде $\rho = \rho(z, t)$, где $z = x - Ut$, U — некоторая постоянная скорость. Принимая во внимание, что полная производная $\partial \rho / \partial t = \partial' \rho / \partial t - U \partial \rho / \partial z$, получаем после ее подстановки в (7) уравнение

$$\frac{\partial' \rho}{\partial t} + (u - U) \frac{\partial \rho}{\partial z} + \left(\frac{2VA}{kT} \right) u \frac{\partial}{\partial z} \left(\sqrt{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) = \frac{u}{l}\rho - h_d u \rho^2. \quad (10a)$$

Далее считаем, что постоянная $U = u$. Поскольку $\partial' \rho / \partial t = (\partial \rho / \partial \gamma) \dot{\gamma}$, где $\dot{\gamma} = b\rho u$, то преобразуя (10a) и вводя безразмерные переменные и координаты

$$\Psi = \frac{\rho}{\rho_2}, \quad \Gamma = \frac{h_d}{b} \gamma, \quad Z = \frac{z}{\Lambda_0},$$

$$\Lambda_0^2 = 2 \left(\frac{VA}{kT} \right) \frac{1}{h_d \rho_2^{1/2}}, \quad (10b)$$

получаем уравнение в безразмерном виде

$$\Psi \frac{\partial \Psi}{\partial \Gamma} + \frac{\partial}{\partial Z} \left(\sqrt{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial Z} \right) = \Psi(1 - \Psi). \quad (11a)$$

При автомодельной форме решения $\Psi(\Gamma, Z') = \phi(\Gamma)\varphi(Z')$, где $Z' = \phi^{-1/4}Z$, переменные $\phi(\Gamma)$ и $\varphi(Z')$

разделяются и вместо (11a) имеем два уравнения

$$\frac{\partial \phi}{\partial \Gamma} = 1 - \phi, \quad \frac{\partial}{\partial Z'} \left(\sqrt{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial Z'} \right) = \phi(1 - \phi). \quad (11b)$$

Решение первого уравнения имеет вид $\phi(\Gamma) = 1 - \exp(-\Gamma)$, а при однократном с помощью подстановки $\phi = \psi^{2/3}$ интегрировании второго уравнения получаем

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial Z'} \right)^2 = \frac{9}{5} \psi^{5/3} \left(1 - \frac{5}{7} \psi^{2/3} \right). \quad (12)$$

Интегрирование (12) с помощью подстановки $\psi = (7/5)^{3/2} f^6$ приводит к эллиптическому интегралу первого рода $F(\theta, k) = Z'/2\sqrt{70}$, $f = \cos \theta$, $k = 2^{-1/2}$. Вводя эллиптическую функцию Якоби $\text{cn}(x, k)$ и используя ранее введенные обозначения, решение уравнений (10a) и (11a) можно записать в следующем компактном виде:

$$\rho(\Gamma, z) = \rho_m [1 - \exp(-\Gamma)] \text{cn}^4 \left(\frac{z}{\Lambda'(\Gamma)}, k \right). \quad (13a)$$

Здесь $\Gamma = (h_d/b)\gamma$, $\rho_m = (7/5)\rho_2$, $z = x - Ut$, $\Lambda'(\Gamma) = \Lambda'_m [1 - \exp(-\Gamma)]^{1/4}$, $\Lambda'_m = 2\sqrt{70} F(\pi/2, k)\Lambda_0$.

Полученное решение описывает эволюцию с деформацией плотности ГНД в виде стационарно движущейся пространственно-модулированной дислокационной структуры с периодом Λ' , зависящим от величины деформации. При величине модуля $k = 2^{-1/2}$ с точностью 10% функцию Якоби можно аппроксимировать тригонометрическим косинусом. В результате (13a) приобретает вид

$$\rho(\Gamma, z) \approx \rho_m [1 - \exp(-\Gamma)] \cos^4 \left(\frac{\pi z}{\Lambda(\Gamma)} \right), \quad (13b)$$

где $\Lambda(\Gamma) = \Lambda_m [1 - \exp(-\Gamma)]^{1/4}$, $\Lambda_m = 2\pi\sqrt{70}\Lambda_0$. На рис. 3, *a-c* показан характер дислокационной структуры согласно (13b) при различных значениях безразмерной деформации Γ . Обращает на себя внимание, что с ростом деформации плотность дислокаций в дислокационных стенках увеличивается, увеличивается также и расстояние между стенками от размера флуктуаций $\lambda_c = (2\pi/3)\rho_2^{-1/2} \approx 1 \mu\text{m}$ до $\Lambda_m = 20 \mu\text{m}$ ($l = 5 \text{ mm}$ и $h_d/b = 5$).

Поскольку $\rho = b^{-1}\partial\omega/\partial z$, разориентация кристалла, связанная с образованием полигонизованной структуры, равна

$$\omega(\Gamma, z) = b \int_0^z \rho(\Gamma, z) dz. \quad (14)$$

На рис. 4, *a* показано распределение поворотов $\omega(z)$ в кристалле согласно (13b) и (14) при $\Gamma \rightarrow \infty$. Видно, что образование каждой дислокационной стенки приводит к разориентации кристалла на угол $\omega_n = (3/8)b\rho_m\Lambda_m$.

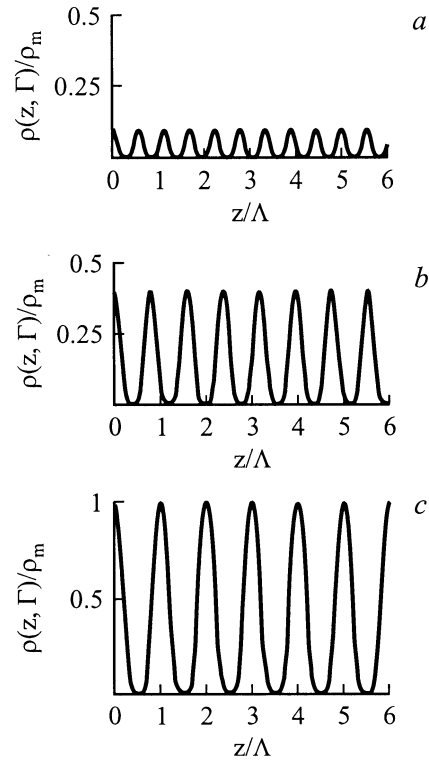


Рис. 3. Распределение плотности дислокаций в изогнутом кристалле при различных значениях безразмерной деформации Γ : 0.1 (*a*), 0.5 (*b*) и ∞ (*c*).

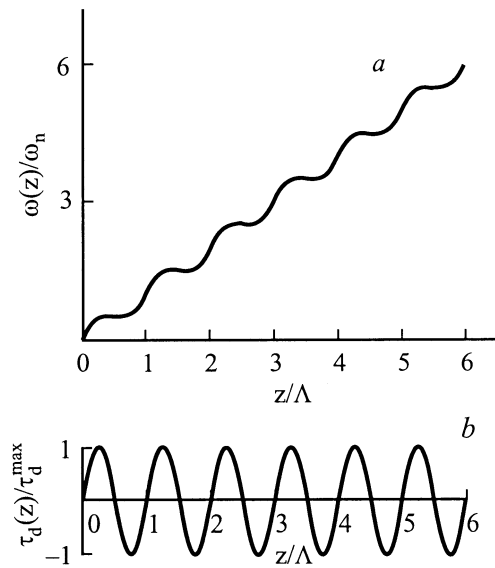


Рис. 4. Распределение углов поворота (*a*) и внутренних напряжений (*b*) в полигонизованной структуре.

С ростом деформации угол разориентации увеличивается как $\omega(\Gamma) = \omega_n [1 - \exp(-\Gamma)]^{5/4}$. Поскольку каждая дислокационная стенка является скоплением дислокаций одного знака, согласно выражениям (6) и (13b) она

вызывает появление напряжений

$$\begin{aligned}\tau_d(z, \Gamma) &= \frac{2A}{\sqrt{\rho}} \frac{\partial \rho}{\partial z} \\ &= \tau_d^{\max} [1 - \exp(-\Gamma)]^{1/4} \sin\left(\frac{2\pi z}{\Lambda_m [1 - \exp(-\Gamma)]^{1/4}}\right), \\ \tau_d^{\max} &= 2\pi \frac{A}{\Lambda_m} \rho_m^{1/2}.\end{aligned}\quad (15)$$

На рис. 4, *b* показано распределение внутренних напряжений в полигонизованной структуре согласно (15) при $\Gamma \rightarrow \infty$. Видно, что напряжения достигают максимума вблизи дислокационной стенки, но в самой стенке они равны нулю.

В заключение приведем количественные оценки параметров полигонизованной дислокационной структуры. Оценка расстояний Λ_m между дислокационными стенками была приведена выше. При указанных выше параметрах получаем $\rho_m = 1.8 \cdot 10^7 \text{ см}^{-2}$, $\omega_n = 3 \cdot 10^{-4}$. По порядку величины эти оценки согласуются с приведенными на рис. 2 результатами [2] ($\omega_n = \Lambda/R = 9 \cdot 10^{-4}$). Что касается внутренних напряжений, то согласно (15) имеем $\tau_d^{\max} \approx 10^{-8} \mu$. Эта оценка представляется заниженной, что может быть связано с используемым для внутренних напряжений приближением (6).

Таким образом, результаты работы показывают, что кинетический подход к механизму образования полигонизованных дислокационных структур в изогнутых кристаллах позволяет рассчитать параметры структур и установить их эволюцию с деформацией.

Список литературы

- [1] M.F. Ashby. *Phil. Mag.* **21**, 170, 399 (1970).
- [2] C.T. Wei, P.A. Beck. *J. Appl. Phys.* **27**, 12, 1508 (1956).
- [3] K. Higashida, J. Takamura, N. Narita. *Mater. Sci. Eng.* **81**, 1/2, 239 (1986).
- [4] Б.И. Смирнов, В.В. Шпейзман, Р.С. Чуднова. *ФТТ* **23**, 10, 2964 (1981).
- [5] S.V. Ray, G.M. Pharr. *J. Amer. Ceramic Soc.* **75**, 2, 347 (1992).
- [6] Г.А. Малыгин. *УФН* **169**, 9, 979 (1999).
- [7] J.E. Nye. *Acta Met.* **1**, 2, 153 (1953).
- [8] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972). 599 с.
- [9] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **37**, 1, 3 (1995).
- [10] Ш.Х. Ханнанов. *ФММ* **84**, 3, 12 (1997).
- [11] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **32**, 4, 1102 (1990).
- [12] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **31**, 7, 43 (1989).