

07,08

Переход от твердорастворного разупрочнения к упрочнению в пластичности кристаллических материалов как проявление квазилокализации дислокационных кинков

© Б.В. Петухов

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ „Кристаллография и фотоника“ РАН,
Москва, Россия

E-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru

Поступила в Редакцию 25 июля 2022 г.

В окончательной редакции 27 июля 2022 г.

Принята к публикации 29 июля 2022 г.

В ряде кристаллических материалов помимо широко известного твердорастворного упрочнения в области низкой концентрации атомов раствора наблюдается также противоположное поведение — повышение пластичности или разупрочнение. В настоящей работе раскрывается механизм конкуренции этих эффектов и показывается, как граница изменения поведения может быть использована для оценки микроскопических параметров материалов. Теория предсказывает тенденции зависимости динамики дислокаций от концентрации легирующих элементов, напряжения, температуры и ряда материальных параметров.

Ключевые слова: конкуренция твердорастворных упрочнения и разупрочнения, дислокационные кинки, случайные процессы.

DOI: 10.21883/FTT.2022.12.53651.450

1. Введение

Широко известен эффект твердорастворного упрочнения кристаллических материалов, объясняемый зацеплением носителей пластической деформации — дислокаций — за локальные искажения кристаллической решетки посторонними атомами [1,2]. Однако в материалах с высоким потенциальным рельефом кристаллической решетки, называемым барьерами Пайерлса, наблюдается также и кажущийся парадоксальным противоположный эффект повышения пластичности при легировании [3] как атомами внедрения, так и атомами замещения. К таким материалам относятся металлы с объемноцентрированной кристаллической (ОЦК) решеткой, некоторые полупроводники, керамики, интерметаллиды и другие [1,3–5], в которых, как установлено, пластичность контролируется преодолением дислокациями кристаллического рельефа. При этом чужеродные атомы вместо того, чтобы создавать дополнительные препятствия для дислокаций, способствуют их перемещению. Наиболее распространенным объяснением такого отсутствия аддитивности механизмов торможения дислокаций является локальное понижение атомами раствора основных барьеров, создаваемых кристаллической решеткой [3,5,6]. Высота кристаллического рельефа в беспримесном кристалле характеризуется так называемым напряжением Пайерлса — минимальным напряжением, устраняющим барьеры для смещения дислокаций между долинами кристаллической решетки [7]. При наличии чужеродных атомов потенциальный рельеф кристаллической решетки усложняется. Эффект повышения пластичности, или разупрочнение, наблюдается при низких кон-

центрациях $\leq 1\%$, сменяясь в области более высоких концентраций упрочнением [3,8]. Переход от разупрочнения к упрочнению исследован до настоящего времени недостаточно и выяснению его механизма посвящена настоящая работа.

Движение дислокаций в таких материалах осуществляется хорошо известным путем образования и распространения кинков, являющимися топологическими солитонами [1,4,7,9]. Свойства этих своеобразных квазичастиц проявляются в макроскопическом масштабе, в частности, в сильной температурной зависимости деформирующих напряжений, объясняемой тем, что образование кинков это термоактивируемый процесс, происходящий в малом объеме с линейным размером порядка десятков периодов решетки [1,4]. Конкуренция эффектов разупрочнения и упрочнения может быть приписана проявлению в макроскопическом масштабе разного влияния атомов раствора на различные стадии, благоприятствуя зарождению и препятствуя распространению кинков [8,10–12].

Влияние примесных атомов может быть как индивидуальным в сильно разреженных твердых растворах, так и посредством коллективных флуктуаций, содержащих случайно сблизившиеся группы атомов. Концентрированные твердые растворы иногда описывают в приближении так называемого „среднего поля“ посредством однородной перенормировки напряжения Пайерлса. Однако при изучении перехода от разупрочнения к упрочнению, происходящего при низких концентрациях твердых растворов порядка одного процента или того меньше, атомы раствора или их случайно сблизившиеся группы образуют далеко отстоящие друг от друга локальные

возмущения и подход среднего поля физически не оправдан. Как хорошо известно для термоактивируемых процессов вообще, при образовании кинков оказываются существенными локальные возмущения, приводящие к неоднородным искажениям дислокационных конфигураций, понижающих барьер для образования зародыша пары кинков. Некоторые важные эффекты, имеющее место в концентрированных твердых растворах, такие как взаимодействие примесей между собой или образование кросскинков [12–14], рассматриваться не будут.

При хаотическом расположении примесей в кристаллической решетке энергетика таких важных конфигураций как дислокационные кинки, одинарные и парные, имеет случайное распределение. Таким образом, описание перехода от разупрочнения к упрочнению требует статистического подхода. Необходимость статистического подхода осознавалась многими авторами [12,15]. При этом возникает нетривиальная проблема получения „статистически достоверных“ результатов для сравнения с экспериментами. Сравнительно просто проблема решается в случае так называемых „самоусредняющихся“ характеристик, например, удовлетворяющих условиям центральной предельной теоремы теории вероятностей сумм большого числа случайных величин с одинаковым распределением, флуктуации которых малы по сравнению со средними значениями [16]. Однако в динамике дислокаций приходится иметь дело и с характеристиками с другими свойствами, о чем еще пойдет речь ниже. Интерпретация экспериментальных данных такого типа зависит от „метода усреднения“, в чем разные авторы нередко расходятся и получают не совпадающие результаты.

Дислокационная динамика даже в упрощенных моделях характеризуется большим числом разнообразных параметров: напряжением Пайерлса, собственными энергиями кинков, потенциалами взаимодействия кинков между собой и с примесными атомами, прикладываемой движущей силой, температурой, концентрацией примесей и рядом других. Представление результатов моделирования такой динамики в столь многомерном пространстве параметров, как правило, является выборочным. Поэтому важно получение аналитического описания динамики, компактно концентрирующего тенденции влияния всех существенных факторов, что и является целью настоящей работы.

Потенциальный рельеф для движения кинков в кристаллах с хаотически распределенными примесями или другими точечными дефектами, как было показано в [10,12], представляет собой случайную функцию, совершающую хаотические блуждания по шкале энергии. Близкий по духу подход использовался также в работе [17], в которой применимость такой модели под именем „Процесс Винера с дрейфом“ обосновывалась с помощью численного моделирования.

В настоящей работе будет изучаться обобщенный кинковый механизм движения дислокаций с учетом

гетерогенного влияния случайно флуктуирующих полей концентрации атомов раствора.

2. Образование кинков на флуктуациях концентрации твердого раствора

При напряжениях ниже пайерлсовского положение прямолинейной дислокации в долине кристаллической решетки является метастабильно устойчивым и для перемещения требуется тепловая флуктуация, перекидывающая часть дислокации через барьер Пайерлса. Термофлуктуационный зародыш смещения дислокации из одной долины кристаллического рельефа в соседнюю в случае напряжений много меньших напряжения Пайерлса, изучаемом в настоящей работе, представляет собой разделенную пару кинк-антикинк. В этом случае ширина кинков много меньше размера всей пары и кинк с антикинком могут приближенно трактоваться как бесструктурные резкие границы зародыша пары. Верхушка зародыша представляет собой отрезок дислокации, расположенный вблизи минимума соседней долины кристаллического рельефа. Энергия пары кинков в свободном от примесей материале есть [7]:

$$E_{kp}(l) = 2E_k - Fl - E_i(l). \quad (1)$$

Здесь E_k — энергия одного кинка или антикинка, l — расстояние между составляющими пару, $F = \sigma bh$ — действующая на кинки движущая сила, создаваемая приложенным извне напряжением σ , b — величина вектора Бюргерса дислокации, h — расстояние между долинами кристаллического рельефа. $E_i(l)$ есть энергия взаимодействия кинков в приближении теории упругости обратно пропорциональная расстоянию между кинками $E_i(l) = \alpha/l$. Коэффициент пропорциональности α согласно [7] составляет примерно $Gb^2h^2/8\pi$, где G — модуль сдвига материала. Уравнение (1) обладает высокой степенью универсальности, так как его функциональный вид и его следствия не зависят от конкретной модели дислокации, влияющей только на входящие в него константы E_k и α , параметризация которых представляет собой отдельную задачу. Минимальная энергия активации пары кинков в чистом материале, дается минимумом функции $E_{kp}(l)$ при оптимальном размере пары $l_0 = \sqrt{\alpha/F}$ и равна $E_0(F) = 2E_k - 2\sqrt{\alpha F}$. Частота термоактивационного зарождения пар кинков на единице длины дислокации в этом случае есть $\Gamma = \Gamma_0 \exp[-E_0(F)/kT]$, где T — температура, k — постоянная Больцмана, Γ_0 малосущественный для дальнейшего предэкспоненциальный фактор. В отсутствие заметного рельефа Пайерлса второго рода кинки свободно распространяются от места рождения до поверхности образца или столкновения с соседними кинками.

Перейдем к твердым растворам и обобщим приведенные выражения при наличии хаотически распределенных в материале чужеродных атомов, называемых

далее атомами раствора или кратко примесями. Напомним, что при описании динамики дислокаций в чистых (идеальных) материалах не было нужды следить за поведением всей совокупности атомов дислокации по отдельности, а использовать в качестве элементарных объектов коллективные моды-кинки. Этому способствовала однородность чистых материалов. Неупорядоченное распределение примесных атомов нарушает однородность материалов. Тем не менее, также имеется возможность избавиться от необходимости оперировать хаотическими конфигурациями примесных атомов во всей совокупности. Такую возможность дает то обстоятельство, что определяющую роль играют экстремально сильные флуктуации, являющиеся в результате этого далеко отстоящими и изолированными. Это позволяет ввести промежуточный уровень описания и оперировать в качестве основных характеристик функциями распределения времен тех же элементарных актов преодоления барьеров зарождения и миграции кинков.

Элементарным актом динамики дислокации является ее перемещение на один период кристаллической решетки независимо от конкретной структуры дислокационного ядра, которое может простирается на несколько периодов решетки, быть расщепленным и т.д. Не ставя себе цели получить количественное описание энергетике процесса в различных конкретных материалах, а лишь представить физическую картину и характерные тенденции зависимостей от существенных параметров, можно рассматривать дислокацию в условно-обобщенном виде, как некий линейный объект в протяженном периодическом потенциальном рельефе. Часто используемый наглядный образ такой системы — струна на наклонной стиральной доске [18].

Среднюю линейную плотность примесей вдоль долины кристаллического рельефа обозначим ρ . В первом приближении учитывается только один ряд примыкающих примесей, будь то примеси замещения в узлах решетки или примеси внедрения в ряду соседних междоузлий, наиболее сильно взаимодействующие с дислокацией в данном положении. Основанием для такого приближения служит тот факт, что в термоактивируемом процессе уменьшение энергии взаимодействия даже на относительно небольшую величину порядка тепловой энергии kT делает такое взаимодействие второстепенным.

Для термоактивируемого движения дислокаций, однако, важна не средняя плотность примесей, а неоднородности создаваемого примесями потенциального рельефа. Рассмотрим влияние некоторого флуктуационного скопления примесей, приводящего к превышению плотности примесей в первой долине рельефа над их плотностью во второй долине на величину $\rho(x) = \rho_2(x) - \rho_1(x)$. Обобщающий выражение (1) потенциал пары кинков центрированных в точках x_1 и x_2 есть

$$E(x_1, x_2) = 2E_k + E_i(\Delta x) - F\Delta x - Nu. \quad (2)$$

Здесь $\Delta x = x_2 - x_1$, $E_i(\Delta x)$ — энергия притяжения кинка и антикинка (для конкретных расчетов в настоящей работе берется часто используемый в приложениях уже упоминаемый вид взаимодействия $E_i(\Delta x) = -\alpha/\Delta x$,

$$N = \int_{x_1}^{x_2} [\rho_2(x) - \rho_1(x)] dx$$

— разность числа примесей на отрезке (x_1, x_2) во второй и первой долинах рельефа ($\rho_2(x), \rho_1(x)$ — соответствующие плотности числа примесей, различие которых имеет чисто флуктуационную природу), u — энергия взаимодействия дислокации с примесным центром. Первоначально мезоскопические феноменологические модели развивались, основываясь на теории упругости, чтобы описать взаимодействие примеси с дислокацией в терминах разности атомных радиусов или упругих модулей примеси и матрицы. Однако экспериментальные результаты для ОЦК-металлов указывают, что эти факторы не могут рассматриваться как главные, ответственные за наблюдаемое поведение (см. например, [19]). Это не удивительно, так как наиболее сильное взаимодействие имеет место, когда примесный атом находится внутри дислокационного ядра, где теория упругости неприменима и существенны короткодействующие химические силы. Более того, взаимодействие примеси с дислокацией континуальными функциями не представляется, и в настоящей работе, как и в [10,12], будет упрощенно характеризоваться единственным параметром u , имеющим микроскопическую природу. Знак u не имеет значения, так как может быть изменен переобозначением номеров долин кристаллического рельефа.

Хаотичность распределения атомов раствора приводит к тому, что кинки образуются и движутся в случайно флуктуирующем потенциальном рельефе. Соответственно, высота барьера для зарождения кинков оказывается случайной величиной, зависящей от месторасположения. Поэтому энергию активации и время рождения пары кинков следует характеризовать функциями распределения, определяемыми статистикой реализации той или иной примесной конфигурации.

Считая распределение примесей полностью хаотичным, вероятность реализации любой примесной флуктуации $\rho(x)$ будем описывать как

$$P\{\rho(x)\} = \exp[\Delta S\{\rho(x)\}],$$

где

$$\Delta S\{\rho_1(x), \rho_2(x)\} = - \int \left[\rho_1(x) \ln \frac{\rho_1(x)}{e\rho} + \rho_1 + \rho_2(x) \ln \frac{\rho_2(x)}{e\rho} + \rho_2 \right] dx \quad (3)$$

есть изменение энтропии идеального твердого раствора вследствие образования данной флуктуации (см. например, [20], в (3) и далее энтропия определяется,

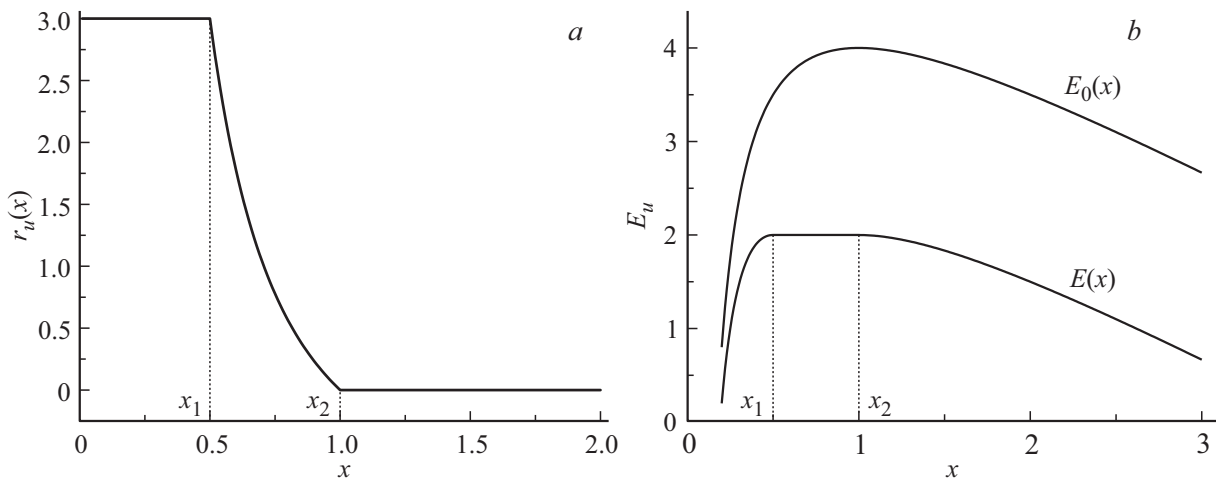


Рис. 1. а) Пример формы оптимального скопления примесей, приводящего к модификации барьера для образования пары кинков, изображенному на рисунке б). Параметры $\Delta E/u = 2$; $F\alpha/u^2 = 1$, длины измеряются в единицах x_0 , плотность примесей в единицах $u/2\alpha$.

следуя [20], как безразмерная величина — логарифм статистического веса состояния).

Вероятность образования пары кинков с какой-либо энергией активации E_a определяется статистическим весом примесных конфигураций, приводящих к соответствующей модификации барьера зарождения кинков. Эта вероятность резко убывает с уменьшением энергии активации E_a по сравнению с $E_0(F)$, так как требуются все более сильные флуктуации примесного распределения. При этом определяющий вклад дает некоторая оптимальная флуктуация, встречающаяся наиболее часто из всех, приводящих к желаемой высоте барьера. Задача нахождения оптимальной формы примесной флуктуации, т.е. приводящей к максимальному изменению энтропии при требуемой энергии активации E_a была решена в работах [21,22], и здесь будут использоваться полученные в них результаты.

Оптимальная конфигурация плотности примесей выглядит симметричным образом, правая часть которого иллюстрируется на рис. 1. До точки максимума потенциала пары кинков плотность примесей ρ_0 однородна, что перенормирует движущую силу к значению $F + \rho_0 u$. При такой величине эффективной движущей силы максимум потенциала достигается в $x_1 = \frac{1}{2}\sqrt{\alpha/(F + \rho_0 u)}$ и имеет значение $E_a = 2E_k - 2\sqrt{\alpha(F + \rho_0 u)}$. Если бы скопление заканчивалось в x_1 , далее потенциал имел бы вид $2E_k - u\rho_0 x_1 - F2x - \alpha/2x$ с отключенной добавкой к движущей силе. То есть шел бы в рост до точки $x_0 = \frac{1}{2}\sqrt{\alpha/F}$ и имел бы в ней максимум, равный $2E_k - 2\sqrt{\alpha F} - u\rho_0 x_1$, который выше предположенного. Чтобы избежать этого противоречия, следует продлить примесное скопление плавно убывающей плотностью примесей $\rho(x) = [\alpha/(2x^2) - 2F]/u$, приводящей к плато потенциала (2). Скопление заканчивается при $\rho(x) = 0$ в точке $x_2 = x_0 = \frac{1}{2}\sqrt{\alpha/F}$. Понижение энергии актива-

ции есть

$$\Delta E = 2E_k - 2\sqrt{\alpha F} - E_a = 2[\sqrt{\alpha(F + \rho_0 u)} - 2\sqrt{\alpha F}].$$

Рис. 1 иллюстрирует понижение барьера для зарождения пары кинков до заданного значения E_a флуктуацией примесей, имеющей наибольшую вероятность реализации. С описанной формой скопления изменение энтропии (3), определяющее эту вероятность, равно

$$\Delta S_{\text{opt}} = -(r_0 r_u)^{1/2} \times \left\{ (1+z)^{1/2} \ln(\sqrt{r_0^2 + 1} + r_0) + \int_0^1 \frac{\sqrt{x+z} dx}{\sqrt{x^2+w}} \right\}. \quad (4)$$

Здесь и в дальнейшем для удобства используются безразмерные параметры

$$r_0 = \rho_0/2\rho = (F_a/r_u)[(2E_{ku} - E_u)^2/4F_a - 1],$$

$$r_u = 2\alpha\rho/u, \quad F_a = \alpha F/u^2, \quad E_{ku} = E_k/u, \quad E_u = E_a/u,$$

$$z = 1/[(2E_{ku} - E_u)^2/4F_a - 1], \quad w = 1/r_0^2. \quad T_u = kT/u.$$

Рассчитанная энтропия определяет функцию распределения $P_a \approx \exp[\Delta S_{\text{opt}}]$ величины энергии активации образования пар кинков E_a в зависимости от различных параметров, как это иллюстрируется на рис. 2. Так как энергия активации определяет время преодоления барьера $t_a \propto 1/\Gamma = 1/\Gamma_0 \exp(E_a/kT)$, полученное выражение дает также распределение времен образования пар кинков. Вклад других, неоптимальных флуктуаций, может изменить предэкспоненциальные множители в рассчитанных функциях распределения, но этим мало существенным обстоятельством в первом приближении будет пренебрегаться.

Хорошо известно, что хотя частота рождения пар кинков на единице длины дислокации $\Gamma = \Gamma_0 \exp[-E_0(F)/kT]$

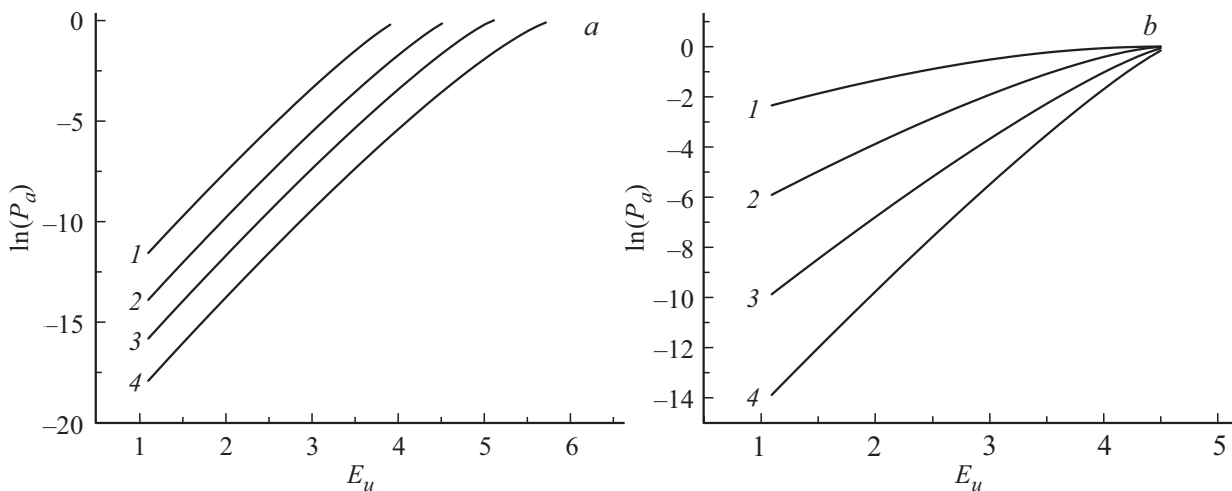


Рис. 2. Зависимость логарифма функции распределения $\Delta S_{\text{opt}} = \ln P_a(E_u)$ от энергии активации E_u образования пары кинков на флуктуационном скоплении примесей при $E_k = 3u$, а) безразмерной концентрации примесей $2\rho\alpha/u = 0.001$ и различных значениях безразмерной движущей силы: $F\alpha/u^2 = 1$ — кривая 1, 0.5 — кривая 2, 0.2 — кривая 3, 0.01 — кривая 4; б) $F = 0.5(\alpha/u^2)$ и различных значениях безразмерной концентрации примесей: $2\rho\alpha/u = 1$ — кривая 1, 0.1 — кривая 2, 0.01 — кривая 3, 0.001 — кривая 4.

в чистом материале определяется энергией пары $E_0(F)$, скорость движения дислокации содержит энергию активации равную половине этой величины $V_d = V_{d0} \exp[-E_0(F)/2kT]$. Причину этого легко понять из простых масштабных соображений. Количество рожденных на единице длины дислокации пар кинков N_{kp} растет пропорционально времени t как $N_{kp} \approx \Gamma t$, так что среднее расстояние между ними приблизительно равно $L_{kp} \approx 1/\Gamma t$. Длина пробега кинка, имеющего скорость v , за время t есть $L_k = vt$. Время жизни кинка, определяемое столкновениями и аннигиляцией с кинками из соседних пар, находится из условия согласования длины пробега L_k и расстояния между народившимися к этому моменту кинками L_{kp} , откуда следует $t_a = 1/\sqrt{v\Gamma}$ и $V_d = a/t_a = (a\sqrt{v\Gamma_0}) \exp[-E_0(F)/2kT]$.

При наличии примесных скоплений, понижающих барьер для зарождения кинков и тормозящих разбегание кинков, масштабное соотношение должно быть модифицировано. Приводимые ниже соотношения являются упрощенными без конкретизации различных предэкспоненциальных множителей.

К количеству пар кинков, свободно родившихся ко времени t на длине L следует прибавить пары, образовавшиеся на примесных скоплениях $(L/l_{1a})P_a(t)$, где l_{1a} — масштабный множитель порядка критического размера пары, время t связано с энергией активации соотношением Аррениуса $t \sim (1/\Gamma_0) \exp(E_a/kT)$. Хотя такие скопления редки, за счет повышенной скорости генерации кинков их вклад может быть сопоставимым и даже преобладающим. Для $P_a(t)$ будет использоваться выражение $P_a(t) = \exp(\Delta S_{\text{opt}})$ с найденным выше ΔS_{opt} (4).

Второй стадией процесса перехода дислокации через барьер является разбегание кинков от места рождения,

также подверженное влиянию примесей. Время пробега кинком расстояния L складывается из времени свободного движения L/v и суммарного времени задержек на примесных барьерах. Вероятность $P_s(t)$ встретить примесное скопление с временем преодоления t или большим была вычислена в работах [10,23] и составляет $P_s(t) = (t_0/t)^\delta$, где t_0 некоторое характерное время элементарного акта, $\delta = (kT/u)\varphi$, а φ находится из соотношения

$$[\exp(\varphi) + \exp(-\varphi) - 2]/\varphi = F/\rho u = 2F_a/r_u. \quad (5)$$

Однако до тех пор, пока среднее время задержки $\langle t_s \rangle = \int_0^\infty P_s(t) dt$ конечно, что имеет место при $\delta > 1$, влияние примесных скоплений на разбегание кинков не слишком существенно. Противоположная ситуация будет рассмотрена в следующем разделе.

Приравнявая среднее расстояние между народившимися парами кинков средней длине пробега, получаем модифицированное уравнение для времени перехода дислокации через барьер Пайерлса t_a

$$1/[\Gamma t + P_a(t)/l_{1a}] \approx vt. \quad (6)$$

Решение этого уравнения иллюстрируется на рис. 3, а нисходящими линиями. Можно видеть, как наличие примесей понижает энергию образования пары кинков в этой области параметров по сравнению с беспримесным материалом. Резкое понижение энергии преодоления барьера обусловлено преобладанием зарождения кинков на благоприятствующих переходу примесных скоплениях.

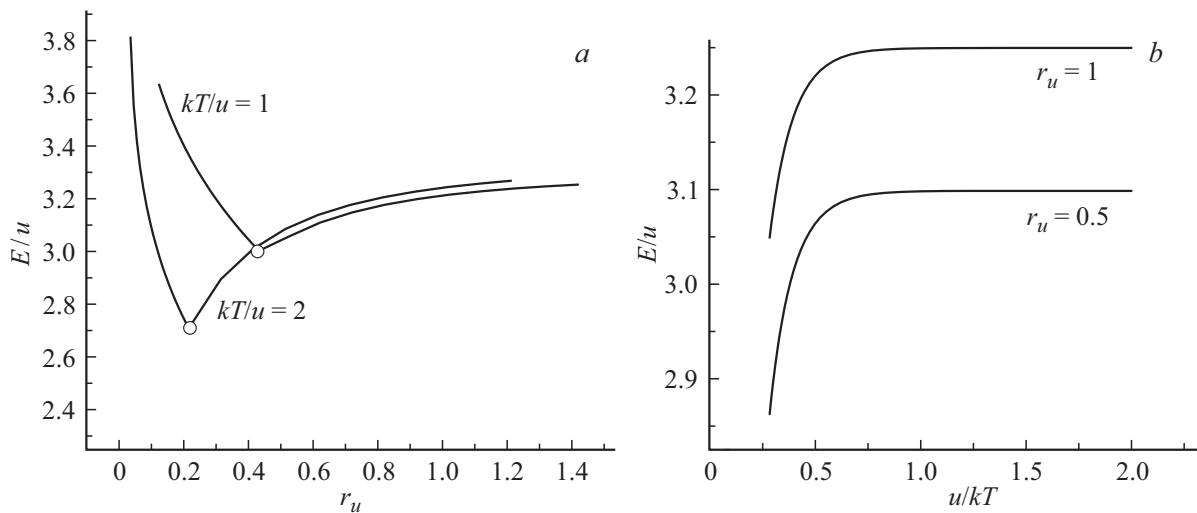


Рис. 3. Зависимость энергии образования пары кинков при движущей силе $F_a = 0.1$ от а) средней плотности примесей для различных значений температуры; б) обратной температуры для различных значений средней плотности примесей. Параметр $E_k = 3u$, $r_u = 2\alpha\rho/u$ — обезразмеренная плотность примесей. Кружками на левом рисунке указаны точки смены режимов движения дислокаций.

3. Торможение разбегания кинков флуктуационными скоплениями примесей

Упрочнение материалов традиционно приписывают зацеплению дислокаций за локальные возмущения кристаллической решетки, создаваемые примесными атомами или их кластерами [24,25]. Рельеф Пайерлса при этом не принимается во внимание. Однако в материалах с высоким кристаллическим рельефом при не слишком больших концентрациях примесей кинковая картина, хотя и в модифицированном виде, сохраняется и имеет место иной механизм торможения дислокаций, связанный с влиянием примесей на разбегание кинков от места их рождения.

В [10,23] было показано, что влияние примесей на динамику дислокационных кинков может приводить к кинетическому фазовому превращению с изменением характера движения и переходом к нелинейному дрейфу или, иначе, к так называемой аномальной кинетике. Такой переход связывался с повышением роли экстремально сильных флуктуаций хаотического примесного рельефа вследствие возникновения медленно убывающих асимптотик времен задержек кинков на них при увеличении концентрации примесных атомов. Это предсказание было экспериментально подтверждено в [26]. Обзор многочисленных работ по аномальной кинетике в различных системах представлен в [27,28]. В этом случае длина пробега кинков x зависит от времени нелинейно как $x \approx x_0(t/t_0)^\delta$, где $\delta < 1$. Если определяемое из уравнения (6) значение φ меньше u/kT , то есть $\delta < 1$, вероятность больших времен задержек убывает настолько медленно, что среднее время задержки

$\langle \tau_s \rangle = \int_0^\infty P_s(t)dt$ расходится и движение кинков имеет аномально медленный характер, называемый квазилокализацией. При δ обращаемся в 1 закон движения переходит в обычный линейный дрейф. Таким образом, условие $\delta = 1$ определяет границу кардинальной смены режимов движения кинков и дислокации в целом. Квазилокализация кинков с повышением концентрации примесей является причиной замедления движения дислокаций и в макроскопическом плане перехода к упрочнению материала.

Заменяя в уравнении (6) длину свободного пробега кинка на длину смещения при нелинейном дрейфе, получаем видоизмененное уравнение для времени перехода

$$1/[\Gamma t + P_a(t)/l_{1a}] \approx x_0(t/t_0)^\delta. \quad (7)$$

Решение уравнения (6) показано на рис. 3, а ниспадающими с увеличением средней концентрации примесей в материале кривыми для различных значений температуры. Решение уравнения (7) изображается восходящими линиями. На правом рис. 3, б это решение показано как функция от обратной температуры. Находящаяся из уравнений (6) и (7) энергия образования пары кинков имеет эффективный характер, так как определяющие ее оптимальные примесные скопления сложным образом зависят от различных параметров. В частности, можно видеть, что с понижением температуры энергия образования пары кинков перестает от нее зависеть. Это объясняется тем, что в широкой области параметров свободное зарождение кинков происходит значительно реже, чем на примесных скоплениях. В этом случае уравнение (7) сводится к следующему, не содержащему температуру

$$S + \varphi E_u = 0. \quad (8)$$

Уравнение (6) соответствует ситуации, в которой влияние примесей благоприятствует зарождению кинков, приводя к ускорению движения дислокаций. Напротив, уравнение (7) или (8) соответствует ситуации, когда влияние примесей особенно сильно сказывается на торможении кинков, замедляя движение дислокаций. Найдя из этих уравнений E_u , нетрудно оценить время перехода дислокации в соседнюю долину кристаллического рельефа $t_a = 1/(l_{1a}\Gamma_0) \exp(E_a/kT)$ и рассчитать среднюю скорость движения дислокаций $V_a = h/t_a = h(l_{1a}\Gamma_0) \exp(-E_a/kT)$. Рис. 3, а наглядно демонстрирует переход от ускоряющего движение дислокаций влияния примесей при относительно низкой их концентрации к тормозящему влиянию при их более высокой концентрации вследствие включения квазилокализационного механизма торможения кинков.

Условие согласования масштабов рождения L_a и разбега L_v кинков $L_a \approx L_v$ определяет из всего спектра времен образования пар кинков типичное время перехода дислокации через барьер Пайерлса. Примечательно, что в том случае, когда рассчитанное значение E_a не зависит от температуры, соотношение $V_a = h/t_a = (h/t_{a0}) \exp(-E_a/kT)$ соответствует закону Аррениуса, выполнение которого в рамках рассматриваемого механизма заранее было трудно предвидеть.

4. Определение энергии взаимодействия примесного атома с дислокацией по экспериментальным данным

Основным микроскопическим параметром теории является энергия взаимодействия примесного атома с дислокацией u . Формулы теории позволяют оценивать ее величину по экспериментальным данным. Согласно изложенным соображениям, граница перехода от разупрочнения к упрочнению соответствует смене режима движения кинков от линейного дрейфа к нелинейному, в которой выполняется условие $\delta = 1$. Подставляя соответствующее значение $\varphi = u/kT$ в соотношение (5), находим u в виде

$$u = kT \ln\left\{\frac{(F/\rho kT + 2)/2 + [(F/\rho kT + 2)^2/4 - 1]^{1/2}}{1}\right\}. \quad (9)$$

Приведем в качестве примера определение энергии взаимодействия примесного атома с дислокацией по экспериментальным данным [29] для твердого раствора атомов Ru в NiAl. Этот материал принадлежит к интерметаллидам, в которых кристаллический рельеф высок и кинки сравнительно резкие, что удовлетворяет условиям применимости изложенной теории. Границе перехода соответствует напряжению $\sigma = 3.98 \cdot 10^8$ Па, концентрация атомов Ru в процентах $\rho = 6.89 \cdot 10^{-3}$, температура эксперимента $T = 293$ К. Подставляя эти значения в формулу (10), получаем энергию взаимодействия $u \approx 0.17$ eV, что с учетом высказанных ранее

оговорок насчет количественных оценок теории, дает достаточно разумный порядок величины.

5. Заключение

В работе приведено теоретическое описание влияния хаотически распределенных примесных атомов на динамику дислокаций в кристаллических материалах в рамках модифицированного кинкового механизма. Рассмотрено влияние примесей на обе существенные стадии процесса движения дислокации: термофлуктуационное образование кинков и их распространение по длине дислокации. Это влияние разнонаправлено и приводит к конкуренции эффектов ускорения и торможения движения дислокаций. На макроскопическом уровне это соответствует конкуренции разупрочнения и упрочнения кристаллов, как это наблюдается в многочисленных материалах с высоким кристаллическим рельефом: в полупроводниках и керамиках, металлах с ОЦК-структурой, интерметаллидах и других, в которых реализуется кинковый механизм движения дислокаций [3]. Теория имеет аналитический характер, что позволяет достаточно наглядно проследить тенденции влияния многочисленных материальных параметров. Сопоставление теории с экспериментальными данными дает возможность оценивать порядок величины микроскопического параметра взаимодействия примесных атомов с дислокациями, как это иллюстрируется по данным [29] для твердого раствора Ru в NiAl.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ „Кристаллография и фотоника“ РАН.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] U. Messerschmidt. Dislocation Dynamics During Plastic Deformation / Ed. Hull R. Berlin. Springer Series in Material Science, Heidelberg (2010).
- [2] Ж. Фридель. Дислокации. Мир, М. (1967). 643 с.
- [3] E. Pink, R.J. Arsenault. Progr. Mater. Sci. **24**, 1 (1980).
- [4] D. Caillard, J.L. Martin. Thermally Activated Mechanisms in Crystal Plasticity. Pergamon, Amsterdam–Boston–London–N.Y.–Oxford–Paris–San Diego–San Francisco–Singapore–Sidney–Tokyo (2003). 433 p.
- [5] D.R. Trinkle, C. Woodward. Science. **310**, 12, 1665 (2005).
- [6] Б.В. Петухов. Кристаллография **52**, 1, 113 (2007).
- [7] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 598 с.
- [8] Y. Zhao, J. Marian. Mod. Simul. Mater. Sci. Eng. **26**, 4, 045002 (2018).

- [9] B.V. Petukhov. Dynamics of dislocations in crystal relief. Dislocation kinks and plasticity of crimetallie materials. Lambert Academic Publishing, Saarbrücken (2016).
- [10] Б.В. Петухов. ФТТ **13**, 5, 1445 (1971).
- [11] A. Sato, M. Meshii. Acta Metallurg. **21**, 6, 753 (1973).
- [12] H. Suzuki. Dislocat. Solids **4**, 191 (1980).
- [13] F. Maresca, W.A. Curtin. Acta Mater. **182**, 1, 144, (2020).
- [14] B.V. Petukhov. Phys. Rev. E **77**, 2, 026601 (2008).
- [15] A. Ghafarollahi, F. Maresca, W. Curtin. Mod. Simulat. Mater. Sci. Eng. **27**, 085011 (2019).
- [16] Б.В. Гнеденко. Курс теории вероятностей. Наука, М. (1988). 451 с.
- [17] A. Ghafarollahi, W. Curtin. Acta Mater. **215**, 6, 117078 (2021).
- [18] J. Cuevas-Maraver, P.G. Kevrekidis, F. Williams. The sine-Gordon model and its applications. From Pendula and Josephson Junctions to Gravity and High-Energy Physics. Nonlinear Systems and Complexity. Springer Switzerland (2014).
- [19] Y.-J. Hu, M.R. Fellingner, B.G. Butler, Y. Wang, K.A. Darling, L.J. Kecskes. Acta Mater. **141**, 12, 304 (2017).
- [20] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Физматлит, М. (2004). 496 с.
- [21] Б.В. Петухов. ФТТ **32**, 2, 579 (1990).
- [22] Б.В. Петухов. ФТТ **35**, 5, 1121 (1993).
- [23] Б.В. Петухов. ФТТ **30**, 2893 (1988).
- [24] N.F. Mott. Imperfections in Nearly Perfect Crystals, edited by W. Shockley, J.H. Holomonn, R. Maurer, F. Seitz. John Wiley, N. Y. (1952). P. 173.
- [25] L. Proville, D. Rodney, Y. Brechet, G. Martin. Phil. Mag., **86**, 25–26, 3893 (2006).
- [26] Yu.L. Iunin, V.I. Nikitenko, V.I. Orlov, B.V. Petukhov. Phys. Rev. Lett. **78**, 3137 (1997).
- [27] J.-P. Bouchaud, A. Georges. Phys. Rep. **195**, 4–5, 127 (1990).
- [28] В.В. Учайкин. УФН **173**, 8, 847 (2003).
- [29] H.T. Li, J.T. Guo, K.W. Huai, H.Q. Ye. Mater. Sci. Technol. **23**, 2, 189 (2007).

Редактор Т.Н. Василевская