

14,15

Сравнительный анализ моделей миграции дислокационных кинков в неупорядоченных твердых растворах

© Б.В. Петухов

Национальный исследовательский центр „Курчатовский институт“,
Москва, Россия

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

Поступила в Редакцию 24 декабря 2023 г.

В окончательной редакции 18 января 2024 г.

Принята к публикации 25 января 2024 г.

Анализируются модели миграции дислокационных кинков в неупорядоченных твердых растворах и сплавах. Изучены механизмы взаимодействия кинков с примесной подсистемой, приводящие к упрочнению кристаллических материалов. Критически обсуждены различные подходы к описанию статистических закономерностей преодоления кинками случайных потенциальных рельефов. Отмечены концептуальные особенности движения кинков в примесных материалах, ведущие к разногласиям трактовок явления. Описана качественная картина аномальной кинетики кинков в неупорядоченных средах.

Ключевые слова: дислокационные кинки, твердорастворное упрочнение, случайные процессы, аномальная кинетика.

DOI: 10.61011/FTT.2024.03.57490.275

1. Введение

В кристаллических материалах с высоким потенциальным рельефом кристаллической решетки, называемым барьерами Пайерлса, таких как металлы с объемно-центрированной кубической структурой (ОЦК), полупроводники, интерметаллиды и многие другие, движение дислокаций происходит путем зарождения и перемещения кинков [1–4]. Кинк представляет собой перегиб, связывающий дислокационные сегменты, расположенные в соседних долинах кристаллического рельефа. Он не является каким-то экзотическим или уникальным объектом. По своим свойствам дислокационные кинки принадлежат к семейству так называемых топологических солитонов [5]. Явления, подобные описываемым ниже, могут происходить при движении ступеней на поверхности растущего кристалла, в биологических макромолекулах, нанопроволоках, при переключении намагниченности в спиновых цепочках и молекулярных магнетиках с цепочечной структурой, и многих других аналогичных одномерных и квазиодномерных структурах [6–9]. Кинетика обратимого перехода между кристаллической и аморфной фазами важна также для записи и считывания информации в оптических и электрических низкоразмерных системах хранения данных [10].

Динамика кинков определяет подвижность дислокаций и скорость пластической деформации кристаллов [1–4]. Помимо барьеров для дислокаций, связанных с собственной кристаллической решеткой, в большинстве материалов имеется примесный рельеф. Он может создаваться как неконтролируемыми примесями, так и преднамеренно вводимыми для модификации материальных параметров. Как правило, растворенные в кристаллах чу-

жеродные атомы представляют собой неупорядоченную подсистему, воздействие которой в различных интервалах концентрации и температуры приводит к многообразию режимов дислокационной динамики [11,12].

В общем случае миграция кинков является, наряду с их рождением, одной из важных стадий перемещения дислокаций, в некоторых режимах в сплавах — контролирующей [13]. Иногда суперпозиция этих стадий описывается суммированием времени рождения пары кинков τ_{kp} и времени их распространения до границ дислокационного сегмента τ_{km} , так что скорость дислокации V_d выражается формулой $V_d = h/(\tau_{kp} + \tau_{km})$, где h — период кристаллической решетки. Для τ_{kp} и τ_{km} используются выражения аррениусовского типа $\tau_{kp,m} = \tau_{kp,m0} \exp(E_{kp,m}/k_B T)$ с некоторыми энергиями активации E_{kp} и E_{km} и предэкспоненциальными факторами τ_{kp0} и τ_{km0} . Здесь k_B — постоянная Больцмана, T — температура. В зависимости от того, какое время τ_{kp} или τ_{km} больше, говорится о преобладании той или иной стадии и используется соответственно упрощенное выражение $V_d \approx h/\tau_{kp,km}$. Такой подход является примером необоснованной трактовки явления, приводящей к его неправильной интерпретации. Это видно хотя бы из того, что в случае $\tau_{kp} \ll \tau_{km}$ за время движения кинков до границ сегмента на нем успеют произойти множественные рождения пар кинков и аннигиляции кинков и антикинков, и вместо выражения $V_d \approx h/\tau_{km}$ следует использовать описание для совсем другого процесса. Применительно к чистым кристаллам учет этого обстоятельства привел к выражению для скорости дислокации $V_d \sim h/\sqrt{\tau_{kp}\tau_{km}} = h/\sqrt{\tau_{kp0}\tau_{km0}} \exp[(E_{kp} + E_{km})/2k_B T]$ [1] с уполовиненными энергиями активации. Это не означает, конечно, что изменились высоты барьеров в эле-

ментарных актах кинетики кинков, а обусловлено самоогласованным характером конкуренции их рождения, миграции и аннигиляции.

Влияние атомов раствора, которые для краткости будут также называться примесями, иногда способствует зарождению кинков. При преобладании этого фактора имеет место увеличение подвижности дислокаций и, как следствие, повышение пластичности материала — „разупрочнение“ [14–18]. Перемещение кинков при наличии примесей происходит не столь легко, как в чистых материалах, так как взаимодействие дислокации с примесными атомами создает вариации энергетического рельефа, являющиеся ловушками или барьерами для кинков, преодоление которых может требовать термической активации. Это создает противоположную тенденцию: замедление дислокаций и понижение пластичности — „упрочнение“ [19–24]. Конкуренция этих тенденций важна не только для конструкционных материалов [25], но и в природных явлениях, например, для механических свойств льда в проблеме потепления климата [26].

В настоящей работе речь будет идти об одной стороне процесса, вызывающей наиболее разноречивые интерпретации — о механизме твердорастворного упрочнения, создаваемым влиянием атомов раствора на миграцию кинков. Построение моделей этого практически важного эффекта имеет продолжительную историю, но в последнее время произошел подъем интереса к этой теме в связи с появлением нового класса перспективных для приложений мультикомпонентных или высокоэнтропийных разупорядоченных сплавов [27–30].

В настоящее время появляются работы, основанные на атомистических компьютерных расчетах взаимодействия дислокаций с примесями ([31] и другие). Однако они, в основном, относятся к индивидуальным примесям и, как отмечается в [32], сталкиваются с проблемами при описании сплавов. В неупорядоченных сплавах существенными оказываются редкие события и маловероятные или экстремальные ситуации, компьютерное моделирование влияния которых представляет сложную задачу и зачастую ведет к противоречивым интерпретациям. Элементарные механизмы дислокационной динамики в результатах моделирования часто оказываются завуалированными. Чтобы иметь наглядную общую картину механизмов движения дислокаций в неупорядоченной примесной подсистеме целесообразно разделить задачу и использовать, когда это возможно, теоретические модели при произвольных значениях микроскопических параметров, а атомистические расчеты проводить отдельно только для их параметризации. Такие атомистические расчеты применительно к конкретным материалам представляют собой самостоятельную проблему и не входят в цели данной работы. Так как кинетика кинков нетривиальна и вызывает разноречивую интерпретацию, полезно в качестве первого шага насколько возможно продвинуться к получению наглядного аналитического описания этой кинетики на концептуальном уровне, что и является целью настоящей работы.

2. Энергетический рельеф для миграции кинка

Первоначально, что совершенно естественно, примесный барьер на пути движения кинка моделировался локальным пиком потенциала, как для обычной частицы (см., например [33,34]). Высота барьеров для одинаковых примесей описывалась одинаковой величиной энергии для термоактивационного преодоления. Предполагаемая зависимость энергии активации от напряжения применялась для аналитических расчетов и Монте-Карло моделирования [32]. Со временем было осознано, что примесный барьер для миграции кинка имеет нелокальный характер, поскольку взаимодействие примеси с дислокацией по разные стороны от кинка различно [19,35–37], так что барьер включает в себя размытую на ширине кинка ступеньку.

Высота ступеньки U представляет собой изменение энергии взаимодействия дислокации с примесью при смещении дислокации на период решетки кристалла h . Эта модификация примесного барьера приводит к серьезным качественным изменениям, так как ступеньки от различных примесей накладываются, создавая кумулятивный эффект, память о преодоленных препятствиях и корреляцию. Вследствие кумулятивного эффекта возникают сильные барьеры на пути движения кинка, к тому же со случайными расположением и высотой. Описание миграции кинка в подобном хаотическом рельефе требует статистического подхода. Такой подход был применен в работах [19,36,37]. В этих работах принималось, что энергия дислокационного сегмента флуктуирует пропорционально случайному числу примесей в ядре дислокации, что создает хаотический потенциальный рельеф на пути перемещения кинка, на который накладывается слагаемое, создаваемое внешней движущей силой F ,

$$U_k(x) = U[N_f(x) - N_i(x)] - Fx. \quad (1)$$

Здесь x — длина перемещения кинка вдоль дислокации, $F = \sigma bh$, σ — напряжение, которое предполагается малым по сравнению с напряжением Пайерлса, при котором разделяющие положения дислокации в долинах кристаллической решетки барьеры сходят на нет. Далее, b — величина вектора Бюргерса дислокации, h — высота кинка, равная периоду кристаллического рельефа, $N_f(x) - N_i(x)$ — разность числа примесей в дислокационном ядре в новом и исходном положениях дислокации соответственно. В (1) фигурирует только максимальное контактное взаимодействие дислокации с примесями из соответствующих рядов кристаллической решетки. Рассматривается случай разбавленных твердых растворов с низкой концентрацией примесей, когда среднее расстояние между ними много больше периода кристалла и дискретностью решетки можно пренебречь.

Распределение примесных атомов вдоль дислокации считалось полностью хаотическим и подчиняющимся

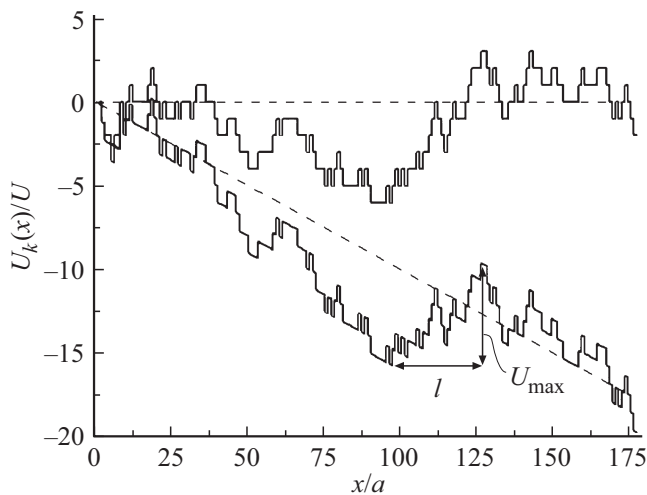


Рис. 1. Частная реализация энергетического ландшафта, образованного вкладом хаотически флуктуирующей плотности атомов раствора (верхняя кривая) и его суперпозицией с вкладом движущей силы $-Fx$ (нижняя кривая). Отмечены высота U_{\max} и размер l наибольшего барьера для движения кинка.

пуассоновской статистике, когда вероятность встретить n примесей на сегменте, содержащем N узлов кристаллической решетки равна $P_{\text{Pois}} = (Nc)^n \exp(-Nc)/n!$ (c — средняя по сегменту концентрация примесей) [38]. Потенциал кинка в поле хаотически расположенных примесей совершает при его перемещении случайные блуждания по шкале энергии, делая разнонаправленные „шаги“ величиной U в случайных точках расположения примесей вдоль дислокации. Это „случайное блуждание“ по шкале энергии, на которое накладывается дрейф под действием внешней движущей силы F [36,37,39–42], проиллюстрировано на рис. 1.

При некоторых условиях, сформулированных ниже, в изучаемой проблеме распределение Пуассона числа примесей может быть аппроксимировано распределением Гаусса $P_{\text{Gaus}} = \exp[-(n-Nc)^2/2Nc]/(2\pi Nc)^{1/2}$ [38]. В этом случае примесный потенциал совершает при перемещении кинка на расстояние L „броуновское движение“ по шкале энергии, размах флуктуаций которого растет пропорционально \sqrt{L} .

3. Миграция кинков при гауссовской статистике примесных скопления

Флуктуационные неоднородности потенциального рельефа, создаваемые хаотическими скоплениями и разрежениями примесных атомов, создают случайные барьеры для движения кинков. Масштаб барьеров растет вместе с ростом размаха флуктуаций потенциального рельефа при увеличении преодолеваемой длины дислокационного сегмента. Путем анализа флуктуаций ансамбля случайных рельефов в работе [19] была оценена средняя

скорость движения кинка v_{av} в гауссовском пределе. В несколько упрощенном виде, без учета небольшой поправки за счет конечной ширины кинка, результат выглядит так

$$v_{av} \approx vL \exp\{-c_1 U^2 \ln[c_1 L / (2\pi)^{1/2} a] / \sigma a b h k_B T\}, \quad (2)$$

где L — длина проходимого кинком дислокационного сегмента, $c_1 = zc$, c — концентрация примесей, z — координационное число, определяемое симметрией прилегающих к ядру дислокации рядов кристаллической решетки (для металлов с ОЦК-решеткой в [19,36] принималось $z = 3$), a — период решетки вдоль дислокации, $v \approx v_D b/d$, v_D — частота Дебая, d — ширина кинка.

В [19] отмечалось, что оценка средней скорости частицы, преодолевающей барьеры в случайном поле сил, может быть интересной проблемой в математике теории вероятности, но еще не решенной. Результат (2) был получен на интуитивной основе, но оказался, в основном, правильным, как показал сделанный по совпадению в то же время расчет на более регулярной основе при посредстве уравнения для производящей функции распределения времен задержек кинка на флуктуационных скоплениях примесей [37]. Приведем кратко полученные в [37] результаты.

В неупорядоченной среде имеется спектр времен задержек на случайных барьерах. Время задержки на потенциальном барьере чаще всего описывают формулой Аррениуса $\tau = \tau_0 \exp(U_{\max}/kT)$, где U_{\max} — высота максимума потенциала барьера, отсчитанная от предшествующего минимума. Если же потенциал барьера $E(x)$ достаточно размыт, как имеет место при наложении барьеров от нескольких примесей, следует пользоваться более общим выражением [43]:

$$\tau = C \int_0^{\infty} \exp[E(x)/k_B T] dx. \quad (3)$$

Постоянная в (3) может быть приближенно оценена как отношение характерных масштабов времени τ_1 и расстояния x_1 , $C = \tau_1/x_1$, о чем еще будет речь далее. В работе [37] изучалась функция распределения $P_d(z)$ интеграла в (3) с потенциалом барьера (1)

$$z = \int_0^{\infty} \exp[U_k(x)/k_B T] dx = \tau/C.$$

Для производящей функции

$$\phi(s) = \left\langle \int_0^{\infty} \exp(-sz) P_d(z) dz \right\rangle$$

распределения $P_d(z)$ (угловые скобки обозначают усреднение по случайным расположениям примесных атомов

в узлах кристаллической решетки) было получено уравнение

$$\frac{c_1}{a} \left\{ \phi[s \exp(U/k_B T)] + \phi[s \exp(-U/k_B T)] \right\} - s \frac{\sigma b h}{k_B T} \frac{d\phi}{ds} - s\phi(s) = 0. \quad (4)$$

В гауссовском пределе (после разложения по $U/k_B T \ll 1$) получается простое уравнение, обратное преобразование Лапласа решения которого имеет вид

$$P_d(z) = \frac{D \exp(-1/dz)}{\Gamma(\delta)(zD)^{1+\delta}}, \quad (5)$$

где $D = (c_1/a)(U/k_B T)^2$ — отношение „коэффициента диффузии“ $(c_1/a)U^2$ примесного потенциала по шкале энергии к квадрату тепловой энергии $(k_B T)^2$,

$$\delta = \sigma b h a k_B T / c_1 U^2, \quad \Gamma(\delta) = \int_0^{\infty} u^{\delta-1} \exp(-u) du$$

— гамма функция Эйлера. Как видно из (5), характерным масштабом переменной z является $1/D$, что и может быть принято за введенный выше масштаб расстояния x_1 . Этот выбор согласуется со сделанными в [39] оценками. Масштабом времени может быть обратная частота $1/\nu$. Функция распределения времен задержек $\tau = Cz$ есть

$$P_d(\tau) = P_d(z) dz / d\tau \approx x_1 \nu P_d(z)_{z=\tau/C}.$$

Характеризовать перемещение кинка с помощью понятия о скорости движения не вполне удобно, так как при $\delta \leq 1$ средняя скорость оказывается зависящей от предстоящей длины пробега и в пределе больших длин пробега стремится к нулю. Более уместным и наглядным представляется использование кинетических зависимостей типичных в вероятностном понимании длин пробега от времени. Статистика пробегов определяются вероятностью $P_{pr}(t) = \int_t^{\infty} P_d(t') dt'$ встретить барьер с временем задержки t или большим и примерно равны согласно [19,37] $L \sim (a/c_1)/P_{pr}(t)$. Как нетрудно видеть из (2),

$$L = v_{av} t \approx (2\pi)^{1/2} (a/c_1) (vt)^\delta. \quad (6)$$

Главный интерес представляют большие времена задержек, для которых из (5) следует

$$P_{pr}(t) = \int_t^{\infty} P_d(t') dt' \sim 1/[\Gamma(1+\delta)(vt)^\delta],$$

что приводит, если не обращать внимания на малосущественные префакторы, к той же временной зависимости типичной длины пробега кинка

$$L \sim (a/c_1)/P_{pr}(t) \sim (a/c_1)(vt)^\delta, \quad (7)$$

что и (6).

Как было отмечено в [37], аномальная зависимость (7), отвечающая нелинейному дрейфу кинка, справедлива при $\delta \leq 1$, а при $\delta > 1$ длина пробега переходит в обычную линейную зависимость $L = v_k t$, где v_k — средняя скорость кинка, имеющая в этом случае конечное значение. Таким образом, несмотря на то, что размах флуктуаций рельефа и масштаб барьеров растут с длиной пробега, пространственно-временная однородность движения кинков в статистическом смысле сохраняется в интервале параметров, отвечающих условию $\delta = \sigma a b h k_B T / c_1 U^2 > 1$. При $\delta = 1$ имеет место своеобразный кинетический фазовый переход с качественным изменением характера движения кинка в области параметров $\delta < 1$. Такой переход связан с повышением роли экстремально сильных флуктуаций, т.е. гетерогенности хаотического примесного рельефа вследствие возникновения медленно убывающих асимптотик времен задержек кинков на них при увеличении концентрации примесных атомов [37,44]. Это кардинально расходится с попытками описать влияние примесной подсистемы в рамках подходов типа „среднего поля“, например, однородной перенормировки рельефа Пайерлса. Редкие большие экстремальные флуктуации примесного рельефа создают достаточно локализованные и далеко отстоящие друг от друга искажения энергетического рельефа и не могут приводить к однородным перенормировкам.

Для описания своеобразного характера движения кинков при $\delta < 1$ еще не выработано общепринятого термина, и оно фигурирует под названиями: аномальная кинетика, фаза „крипа“ или нелинейный дрейф при $\delta < 1$, гетерогенная динамика, режим квазилокализации, поскольку средняя скорость $L/t \sim L^{1-1/\delta} \rightarrow 0$ при $L \rightarrow \infty$ и другими. Медленно спадающие асимптотики функций распределения больших значений величин иногда называют „толстыми (или тяжелыми) хвостами“ (Fat-Tailed or Heavy-Tailed Distributions) [45].

В работах [39,46,47] был подчеркнут специфический характер энергетического рельефа, в котором движется кинк в неупорядоченной среде. Этот рельеф представляет собой не то, что обычно называется случайным потенциалом, а, в действительности, „поле случайных сил“. Когда кинк проходит расстояние x вдоль дислокации, та приобретает энергию (без учета внешней силы):

$$U_k(x) = \int_0^x [U_d(x' + h) - U_d(x')] dx'. \quad (8)$$

Здесь $U_d(x) = (c_1/a)\rho(x)$ — действительный энергетический рельеф дислокации с учетом примесей, распределенных с линейной плотностью $\rho(x)$ и имеющих статистические свойства случайного потенциала, а аналогичные статистические свойства имеет производная от энергии $U_k(x)$ по смещению x , то есть сила. Случайный рельеф типа $U_k(x)$ по терминологии [48] обладает сильной корреляцией, т.е. простирающейся на всю систему. Движение в поле случайных сил значительно отличается по своим свойствам от движения в случайном

потенциале. Например, как было показано в работе [49], диффузионное смещение (в отсутствие движущей силы) подчиняется закону $x \sim \ln^2(t)$ вместо обычной для броуновского блуждания корневой зависимости $x \sim t^{1/2}$.

Предположение Сузуки [19] о возможных интересных проблемах, связанных с движением частицы в поле случайных сил, было подтверждено в многочисленных работах (см. например, обзоры [39,48,50,51,53]) в широком контексте статистической физики. А также и в более общем контексте математической и финансовой статистики [46,52]. В этих и других работах закон нелинейного дрейфа (7) получил точную формулировку на основе распределений Леви [53].

При сравнении с экспериментом результатов теоретического расчета неупорядоченных систем первостепенное значение имеют усредненные характеристики. При этом следует оговориться: когда они существуют и отвечают физическому смыслу. Например, как показано в [37], среднее время $\langle \tau \rangle = \int_0^{\infty} P_d(t) dt$ преодоления флуктуационных препятствий кинком конечно при $\delta > 1$, но расходится на неограниченном интервале при $\delta \leq 1$. Это нетрудно видеть и из приведенной асимптотики вероятности больших времен задержки $P_d(t) \sim 1/t^\delta$. Главный вклад во время преодоления кинком некоторого расстояния L вдоль дислокации складывается из времен задержек на отдельных препятствиях. Согласно теоремам математической статистики [54], при большом числе задержек N_t сумма всех слагаемых имеет относительно небольшие отклонения от среднего значения $N_t \langle \tau \rangle$, когда среднее $\langle \tau \rangle$ существует. Это позволяет считать среднее время преодоления препятствия кинком $\langle \tau \rangle$ при $\delta > 1$ величиной, имеющей достоверный физический смысл, называемой иногда „самоусредняющейся“.

Другая ситуация при $\delta \leq 1$ и расходящемся средним времени преодоления препятствия, когда основной вклад в сумму дает наиболее сильное препятствие с наибольшей высотой барьера U_{\max} на интервале, преодолеваемое с помощью термической активации за время $\tau_{\max} \approx \tau_0 \exp(U_{\max}/k_B T)$. В работе [41] для описания миграции кинка применялась та же статистика потенциальных рельефов, называемых здесь процессом Винера (Wiener) с дрейфом, что и в [36,37]. Прделанная в [41,42] большая работа по компьютерному моделированию создаваемого примесной подсистемой ансамбля случайных потенциальных рельефов убедительно продемонстрировала применимость к описанию их статистики модели Винера с дрейфом. Однако применение для аналитической характеристики подвижности кинка при $\delta \leq 1$ средней величины высоты барьеров $\langle U_{\max} \rangle$, то есть, фактически, логарифма времени максимальной задержки $k_B T \langle \ln(\tau_{\max}/\tau_0) \rangle$, а не, например, $k_B T \ln(\langle \tau_{\max} \rangle/\tau_0)$, не обосновывалось. Использование же строгой математической теории сумм случайных величин [47,54] приводит к такой картине: распределение смещений кинков со временем качественно представляет собой размытый пакет, сдвигающийся при больших временах пропорционально

$\sim t^\delta$ с шириной пакета растущей как $\sim t^{\delta/(1+\delta)}$. Таким образом, и для движения кинков через череду случайных препятствий имеет место то же соотношение между характерными масштабами времени движения и длины пробега кинков, что и для оцениваемого по одному наиболее сильному на интервале, как и ожидалось.

4. Миграция кинков при пуассоновской статистике примесных скоплений

Считается, что гауссовская статистика примесей применима, когда их число мало по сравнению со средним числом в рассматриваемом интервале. Однако когда оказываются важными экстремально большие флуктуации в распределении примесных атомов это может не иметь место. Основные описанные в предыдущем разделе результаты с помощью полученных в [37] соотношений могут быть обобщены и на ситуации с любым числом примесей, а также может быть уточнено условие применимости гауссовской статистики в изучаемой проблеме.

Так как главный интерес представляют большие времена задержек кинка, следует искать решение уравнения (4) при малых значениях сопряженной времени лапласовской переменной s , которым, как нетрудно убедиться, оказывается $\phi(s) \sim s^\delta$. Из уравнения (4) следует более общее выражение для показателя степени $\delta = (k_B T/U)\phi$, где ϕ — находится из соотношения [55]:

$$\frac{\sigma b h a}{c_1 U} = [\exp(\phi) + \exp(-\phi) - 2]/\phi. \quad (9)$$

Обращая $\phi(s)$, получаем, что вероятность $P_{pr}(\tau)$ встретить задержку кинка, превышающую τ , ведет себя при больших τ как

$$P_{pr}(\tau) = B/\tau^\delta, \quad (10)$$

где B — некоторая константа. При $\phi \ll 1$ из (9) следует $\phi \approx \sigma b h a / c_1 U$ и выражение для $\delta = (k_B T/U)\phi$ переходит в фигурирующее в предыдущем разделе $\delta = (\sigma b h a k_B T / c_1 U^2)$. Таким образом, условием применимости гауссовского приближения является

$$\phi \approx \sigma b h a / c_1 U \ll 1, \quad (11)$$

то есть энергии, набираемой на среднем расстоянии между примесными атомами за счет внешней силы, должно быть недостаточно для преодоления барьера, создаваемого одной примесью. Однако и в тех случаях, когда условие (11) не выполняется и такой энергии достаточно для преодоления единичного барьера, в игру могут вступать более редкие препятствия, образованные примесными скоплениями. Выражение для основного параметра δ при этом видоизменяется к более общему $\delta = (k_B T/U)\phi$ с ϕ определяемым формулой (9) и иллюстрируемым на рис. 2.

В гауссовском пределе значение δ , приведенное под формулой (5), есть $\delta = \sigma b h a k_B T / c_1 U^2 = \gamma k_B T / U$, что согласуется с поведением кривых на рис. 2 в области

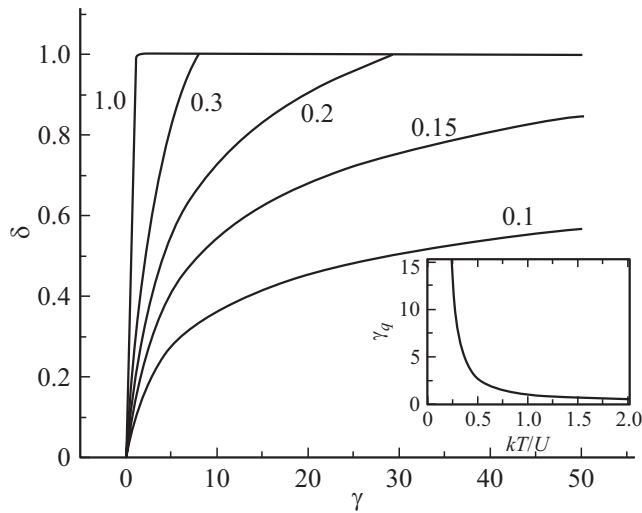


Рис. 2. Зависимость индекса δ от напряжения $\gamma = \sigma bha/c_1U$ при различных значениях температуры $k_B T/U$, указанных цифрами у кривых. На вставке показана зависимость напряжения границы квазилокализации $\delta = 1$ от температуры (напряжение и температура характеризуются безразмерными параметрами $\gamma = \sigma bha/c_1U$ и $k_B T/U$ соответственно).

малой движущей силы $\gamma = \sigma bha/c_1U \ll 1$, но заметно расходится с поведением, предписываемым пуассоновской статистикой в более широкой области параметров. На вставке к рис. 2 показано следующее из уравнения (9) соотношение параметров, отвечающее границе квазилокализации $\delta = 1$ ($\varphi = U/k_B T$):

$$\frac{\sigma bha}{c_1U} = \frac{k_B T}{U} \left[\exp\left(\frac{U}{k_B T}\right) + \exp\left(-\frac{U}{k_B T}\right) - 2 \right]. \quad (12)$$

Оценим с его помощью напряжение перехода в квазилокационный режим σ_q при типичном для ОЦК-металлов масштабе энергии взаимодействия примесного

атома с дислокацией $U \approx 0.05$ eV, низкой концентрации примесей $c_1 \sim 0.1$ и температуре $T = 580^\circ$ К. Получаем из (12) $\sigma_q \approx 120$ МПа. С понижением температуры σ_q резко нарастает и захватывает область деформирующих напряжений при большинстве механических испытаний [3].

Скажем несколько кратких слов о более продвинутых и формализованных подходах теории вероятности. При перемещении кинка под действием внешней силы на большое расстояние ему приходится последовательно преодолевать ряд препятствий и времена задержек на каждом препятствии суммируются. На достаточно большой длине пробега x встречается приблизительно $N \approx (c_1/a)x$ препятствий. Согласно статистической теории распределений сумм случайных слагаемых (см. например, [50,54]), плотность распределения нормированной суммы N случайных положительных слагаемых $t = \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_N$, распределение каждого из которых имеет асимптотику B/τ^δ ($\tau \rightarrow \infty$), дается функцией Леви

$$L_{\delta,1}(t/N^{1/\delta}) = \frac{1}{2\pi i} \int_{d-i\infty}^{d+i\infty} \exp \left[st/N^{1/\delta} - \frac{\pi B}{\sin(\pi\delta)\Gamma(\delta)} s^\delta \right] ds = -\frac{N^{1/\delta}}{\pi t} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{-\pi B N}{\Gamma(\delta) \sin(\pi\delta) t^\delta} \right)^k \frac{\Gamma(1+k\delta) \sin(\pi\delta k)}{k!}. \quad (13)$$

Функция $L_{\delta,1}(t/N^{1/\delta})$ (13) дает достаточно полное описание распространения фронта движения кинков в поле случайно распределенных примесей.

Основные качественные черты пробегов кинка в области аномальной подвижности проиллюстрированы на рис. 3 частным случаем $\delta = 1/2$, когда распределение Леви выражается через элементарные функции $L_{1/2,1}(u) = [B/(\pi^{1/2}u^{3/2})] \exp(-B^2/4u)$. Здесь $u = vt/N^2$; $N = Lc_1/a$.

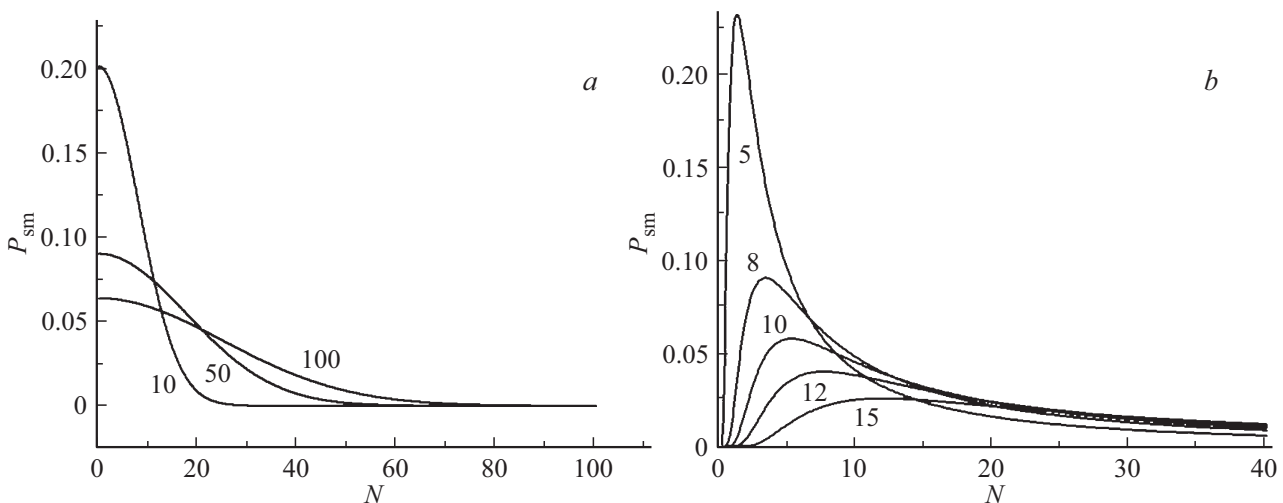


Рис. 3. *a* — распределение длин пробегов для различных интервалов времени, указанных цифрами у кривых; *b* — распределение времен преодоления различных отрезков расстояний, указанных цифрами у кривых.

Протяженные асимптотики на рис. 3, *b* иллюстрируют медленное убывание вероятности больших задержек кинков на создаваемых случайными скоплениями примесей препятствиях.

5. Заключение

Своеобразный характер дислокационных кинков, проявляющийся, в частности, в нелокальности их взаимодействия с примесными атомами в твердых растворах и сплавах, и последствия этого не слишком охотно признаются многими исследователями. Не случайно популярным названием закономерностей движения подобных объектов является аномальная или странная кинетика [51]. Слишком велика инерция трактовки кинков как обычных частиц, последовательно преодолевающих нескоррелированные барьеры индивидуальных примесей. Такой подход позволяет использовать привычную картину элементарного акта как термоактивируемого скачка, описываемого законом Аррениуса с определенной энергией активации. Однако это приводит к ряду концептуальных неточностей и вызывает несогласованность моделей явления. Перечислим некоторые из таких неточностей, имеющих принципиальное значение.

1. Описание суперпозиции зарождения и распространения кинков как последовательных процессов, длительности которых аддитивны.

2. Описание создаваемого примесным атомом препятствия для движения кинка как локального барьера.

3. Траптовка примесного рельефа для движения кинка как случайного потенциала, а не как поля случайных сил.

4. Игнорирование кумулятивного эффекта от наложения индивидуальных примесных барьеров вследствие их нелокальности.

5. Игнорированное бесконечной длины корреляции потенциального примесного рельефа.

6. Ненадлежащий выбор статистических параметров для характеристики кинетики кинков в случайном примесном рельефе.

7. Игнорирование условий и границ применимости типов статистики потенциальных рельефов для миграции кинков.

8. Игнорирование определяющей роли экстремальных флуктуаций в аномальном режиме движения дислокаций в попытках описать влияние примесной подсистемы однородными перенормировками барьеров Пайерлса.

Несмотря на наличие хорошо разработанной современной теории случайных блужданий в случайном окружении, до настоящего времени сохраняется существование работ по динамике дислокационных кинков, в разной степени учитывающие необходимость корректировки тех или иных погрешностей из приведенного перечня. Сложность выделения миграции кинков из многочисленных накладывающихся при макроскопическом пластическом течении материалов или даже при перемещении отдельных дислокаций процессов

затрудняет непосредственную проверку теоретических представлений. Нередко бывает сложно сопоставлять экспериментальные данные даже для однотипных материалов ввиду большого количества влияющих факторов. Тем не менее некоторые экспериментальные данные для полупроводниковых материалов согласуются с изложенной во многом упрощенной теорией аномальной миграции кинков [56,57]. Отметим, не входя в подробности, некоторые имеющиеся направления развития моделей кинетики кинков в неупорядоченных материалах. Это, в частности, переход от разбавленных к более концентрированным твердым растворам, особенно актуальный применительно к многокомпонентным или высокоэнтропийным сплавам [22], учет эффекта динамического старения дислокаций, ведущего к асимметрии распределения примесных атомов в окрестности дислокационного ядра [58], конкуренция твердорастворного упрочнения и разупрочнения [14,59], учет корреляции атомов раствора [60].

Имеющиеся тенденции к улучшению контроля условий эксперимента и к переходу на более глубокий наночастиц уровень исследований позволяют надеяться на прогресс в этом направлении. Проверке концептуальных представлений может способствовать компьютерное моделирование, и в настоящее время многое из приведенного перечня подтверждено в работах [41,42] и сам этот перечень может быть полезным гидом для более полной проверки, ведущей к углублению понимания процессов твердорастворного упрочнения материалов.

Финансирование работы

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ „Курчатовский институт“.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 598 с.
- [2] S. Takeuchi, T. Suzuki. Strength of Metals and Alloys (ICSMA 8). Pergamon (1989). P. 161–166.
- [3] U. Messerschmidt. Dislocation dynamics during plastic deformation / Ed. Hull R. Berlin. Springer Science & Business Media, Heidelberg (2010).
- [4] Б.В. Петухов Динамика дислокаций в кристаллическом рельефе. Дислокационные кинки и пластичность кристаллических материалов. Saarbrücken: Lambert Academic Publishing. (2016). 385 с. ISBN 978-3-659-94939-5. EDN UVWRYG.
- [5] T. Vachaspati. Kinks and Domain Walls. An Introduction to Classical and Quantum Solitons. Cambridge University Press. Cambridge, N.Y. Melbourne, Madrid, Cape Town, Singapore, São Paulo (2006).
- [6] One-Dimensional Nanostructures / Ed. Z.M. Wang. Springer Science + Business Media, N. Y. (2008).

- [7] B. Petukhov. *J. Stat. Mech.* **2013**, 7, P09019 (2013). doi:10.1088/1742-5468/2013/09/P09019
- [8] Nanowires Science and Technology / Ed. N. Lupu. InTech (2010).
- [9] Molecular Magnets. Physics and Applications / Eds J. Bartolome, F. Luis, J.P. Fernandez. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (2014).
- [10] X. Sun, B. Yu, G. Ng, M. Meeuyappan. One-Dimensional Nanostructures. In [8], **3**, 273 (2010).
- [11] E. Nadgornyi. *Progr. Mater. Sci.* **31**, 1 (1988).
- [12] P. Haasen. *Physical Metallurgy* **3**. Elsevier (1996). Ch. 23, 2009.
- [13] A.S. Argon. *Strengthening mechanisms in crystal plasticity*. Oxford University Press (2008).
- [14] E. Pink, R.J. Arsenault. *Progr. Mater. Sci.* **24**, 1 (1980).
- [15] Б.В. Петухов. *Кристаллография* **52**, 1, 113 (2007).
- [16] C. Ren, Z.Z. Fang, M. Koopman, B. Butler, J. Paramore, S. Middlemas. *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* **75**, 170 (2018).
- [17] C. Gupta, J.K. Chakravarty. *Phys. Status Solidi A* **206**, 4, 685 (2009).
- [18] Y.H. Zhang, E. Ma, J. Sun, W.Z. Han. *Acta Mater.* **264**, 119586 (2023).
- [19] H. Suzuki. In: *Dislocations in Solids/ V. 4* / Ed. F.R.N. Nabarro. North-Holland, Amsterdam (1979). P. 191.
- [20] Р.У. Кан, П. Хаазен. *Механические свойства твердых растворов и интерметаллических соединений. Физическое металловедение* **3**, 24, 215 (1987).
- [21] C. Varvenne, M. Leyson, M. Ghazisaeidi, W.A. Curtin. *Acta Mater.* **124**, 660 (2017).
- [22] O.N. Senkov, S. Gorsse, D.B. Miracle. *Acta Mater.* **175**, 394 (2019).
- [23] *Physics of solid solution strengthening* / Ed. E. Collings. Springer Science & Business Media (2012).
- [24] S.I. Rao, E. Antillon, C. Woodward, B. Akdim, T.A. Parthasarathy, O.N. Senkov. *Scripta Mater.* **165**, 103 (2019).
- [25] Y. Zhao, J. Marian. *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **26**, 4, 045002 (2018).
- [26] R. Thomas. *Understanding the Mechanics of Natural Ice*. MS Thesis. University of Otago, Dunedin, New Zealand (2020).
- [27] E.P. George, D. Raabe, R.O. Ritchie. *Nature Rev. Mater.* **4**, 8, 515 (2019).
- [28] Y. Tang, R. Wang, B. Xiao, Z. Zhang, S. Li, J. Qiao, P.K. Liaw. *Progr. Mater. Sci.* 101090 (2023).
- [29] X. Zhou, X. Wang, L. Fey, S. He, I. Beyerlein, P. Cao, J. Marian. *MRS BULL.* **48**, 777 (2023).
- [30] А.С. Рогачев. *Физ. металловедение* **121**, 8, 807 (2020).
- [31] H.A. Khater, G. Monnet, D. Terentyev, A. Serra. *Int. J. Plast.* **62**, 34 (2014).
- [32] S. Shinzato, M. Wakeda, S. Ogata. *Int. J. Plast.* **122**, 319 (2019).
- [33] V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya, R. Thomson. *Phys. Rev.* **131**, 1, 58 (1963).
- [34] В.В. Рыбин, А.Н. Орлов. *ФТТ* **11**, 11, 3251 (1969).
- [35] T. Ninomiya, R. Thomson, F. Garcia-Moliner. *J. Appl. Phys.* **35**, 12, 3607 (1964).
- [36] H. Suzuki. *Nachrichten der akademie der wissenschaften in Gottingen II Mathematisch-Physikalische Klasse.* **6**, 113 (1971).
- [37] Б.В. Петухов. *ФТТ* **13**, 5, 1445 (1971).
- [38] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика*. Наука, М. (1976). 584 с.
- [39] J.P. Bouchaud, A. Comtet, A. Georges, P. Le Doussal. *Ann. Phys. (N.Y.)* **201**, 2, 285 (1990).
- [40] E. Antillon, C. Woodward, S.I. Rao, B. Akdim. *Acta Mater.* **215**, 117012 (2021).
- [41] F. Maresca, W.A. Curtin. *Acta Mater.* **162**, 144 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.10.007>
- [42] A. Ghafarollahi, W. Curtin. *Acta Mater.* **215**, 6, 117078 (2021). <https://doi.org/j.actamat.2921.117078>
- [43] С. Чандрасекар. *Стохастические проблемы в физике и астрономии*. ИЛ (1947).
- [44] Б.В. Петухов. *ФТТ* **58**, 4, 677 (2016).
- [45] R.M. Cooke, D. Nieboer, J. Misiewicz. *Fat-Tailed Distributions: Data, Diagnostics and Dependence*. **1**. John Wiley & Sons (2014).
- [46] V.M. Vinokur. *J. Physique* **47**, 9, 1425 (1986).
- [47] J.P. Bouchaud, A. Georges. *Phys. Rep.* **195**, 4–5, 127 (1990).
- [48] S.N. Majumdar, A. Pal, G. Schehr. *Phys. Rep.* **840**, 1 (2020). <https://www.elsevier.com/open-access/userlicense/1.0/>
- [49] Я.Г. Синай. *Теория вероятностей и ее применения* **27**, 2, 247 (1982).
- [50] V.V. Uchaikin, V.M. Zolotarev. *CHANCE and STABILITY. Stable Distributions and their Applications*. VSP, Moscow (1999). 570 p.
- [51] В.В. Учайкин. *УФН* **173**, 8, 847 (2003).
- [52] S.I. Resnick. *Heavy Tail Phenomena: Probabilistic and Statistical Modeling*. N.Y. Springer Science—Business Media (2007).
- [53] B.D. Huges. *Random Walks and Random Environment*. Cambridge University Press (1995).
- [54] Б.В. Гнеденко, А.Н. Колмогоров. *Предельные теоремы для сумм независимых случайных величин*. Гос. изд-во техн.-теор. лит. (1949) 264 с.
- [55] Б.В. Петухов. *ФТТ* **30**, 10, 2893 (1988).
- [56] J.P. Bouchaud, A. Georges. *Comments Condens. Mater. Phys.* **15**, 3, 125 (1991).
- [57] Yu.L. Iunin, V.I. Nikitenko, V.I. Orlov, B.V. Petukhov. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 16, 3137 (1997). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.3137>
- [58] B.V. Petukhov. In: *Challenges and Advances in Chemical Science* / Eds. P.K. Bhowmik. **4**, 102 (2021). doi.org/10.9734/bpi/cacs/v4/2371F
- [59] Б.В. Петухов. *ФТТ* **64**, 12, 1972 (2022).
- [60] B.V. Petukhov. *Phys. Rev. E* **77**, 02660 (2008).

Редактор Ю.Э. Кумаев