01;05

Динамическое торможение дислокаций в кристалле, содержащем структурные несовершенства

© В.В. Малашенко

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины,
82114 Донецк, Украина
Донецкий государственый технический университет,
83000 Донецк, Украина
e-mail: malashenko@kinetic.ac.donetsk.ua

(Поступило в Редакцию 9 июня 2008 г.)

Предложен и проанализирован новый механизм динамического торможения дислокаций. Пара дислокаций рассматривается как линейный гармонический осциллятор. Исследуемый механизм диссипации заключается в необратимом переходе кинетической энергии движущихся дислокаций в энергию колебаний дислокационного осциллятора. Предложенный механизм использован для вычисления силы торможения движущейся пары дислокаций неподвижными закрепленными дислокациями и для торможения одиночной дислокации дислокационными диполями. Вычислена также сила радиационного торможения движущейся пары дислокаций.

PACS: 61.72.Ff, Hh, Lk; 62.20.Fe

Введение

В реальных кристаллах обычно содержится некоторое количество дислокаций, жестко закрепленных комплексами примесей, узлами дислокационной сетки и т. д., а также дислокационных диполей, состоящих из пары дислокаций с противоположными векторами Бюргерса. Взаимодействие движущихся дислокаций с неподвижными играет огромную роль в процессах деформационного упрочнения и пластической деформации, поэтому исследованию этого вопроса посвящено значительное количество как экспериментальных, так и теоретических работ [1–3]. В большинстве теоретических работ методами машинного моделирования исследовалось движение одиночной пробной дислокации через лес гибких либо жестких параллельных дислокаций леса, пересекающих плоскость скольжения пробной дислокации, причем задача решалась в квазистатическом приближении (малые скорости движения дислокаций). В работе [4] теоретически исследовалось движение одиночной вентовой дислокации через систему палаллельных ей винтовых дислокаций с высокой скоростью, т. е. при внешних напряжениях $\sigma > \sigma_i = (\mu b/2\pi)n^{1/2}$, где μ — модуль сдвига, n — плотность закрепленных дислокаций. При таких скоростях движение дислокации лимитируется динамическими механизмами торможения. Раскачивание сегментов дислокаций леса движущейся дислокацией приводило к необратимым потерям ее кинетической энергии, именно в этом и заключался исследованный в работе [4] механизм торможения. Результаты этой работы были использованы в обзоре [5]. Применительно к эксперименту данная работа обсуждалась авторами работ [6,7].

Как известно, краевые дислокации, расположенные в параллельных плоскостях скольжения, способны образовывать устойчивые конфигурации, выстраиваясь одна над другой [8]. Этот процесс является основой полигонизации, в результате которой в кристаллах возникают дислокационные стенки. Наличие небольших групп и стенок дислокаций весьма характерно для структуры, образующейся в ходе легкого скольжения, особенно при больших деформациях или при локальном действии изгибающих моментов, когда возникает высокая плотность дислокаций, преимущественно одного знака [9]. Под действием внешних напряжений такие образования могут перемещаться по кристаллу. В работах [10,11] анализировалось движение пары краевых дислокаций в параллельных плоскостях скольжения кристалла, содержащего хаотически распределенные точечные дефекты. Диссипация энергии происходила благодаря переходу кинетической энергии дислокации в энергию колебания элементов дислокации относительно ее центра масс.

В настоящей работе исследуется движение пары краевых дислокаций, скользящих с высокими скоростями в параллельных плоскостях через систему краевых дислокаций, параллельных данной паре, а также скольжение одиночной дислокации, взаимодействующей с параллельными ей неподвижными дислокационными диполями. Пара дислокаций представляет собой линейный гармонический осциллятор, колебания которого могут быть возбуждены благодаря взаимодействию с неподвижными дислокациями. Механизм диссипации заключается в необратимом переходе кинетической энергии движущихся дислокаций в энергию их колебаний относительно центра масс дислокационной пары. Ранее такой механизм не предлагался и не анализировался.

Теоретический анализ

Пусть две бесконечные краевые дислокации под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 движутся в параллельных плоскостях: одна — в плоскости XOZ (т.е. $y = 0$), а вторая — в плоскости $y = a$, где a — расстояние между плоскостями скольжения. Линии дислокаций параллельны оси OZ, их векторы Бюргерса имеют координаты $(b, 0, 0)$, т.е. параллельны оси OX, в положительном направлении которой центр масс данной дислокационной пары движется с постоянной скоростью v. Линии неподвижных краевых дислокаций в настоящей работе считаются жесткими, они также параллельны оси OZ, их векторы Бюргерса для простоты будем считать такими же, как и векторы скользящих дислокаций. Взаимодействие движущихся дислокаций с неподвижными приводит к тому, что подвижные дислокации начинают совершать колебания в своих плоскостях скольжения относительно плоскости $x = vt$, перпендикулярной этим плоскостям. Положение дислокаций определяется функциями

$$X_1(y = 0; t) = vt + w_1(y = 0; t),$$

$$X_2(y = a; t) = vt + w_2(y = a; t), \tag{1}$$

где $w_1(y = 0, z, t)$, $w_2(y = a, z, t)$ — случайные величины, среднее значение которых по ансамблю дислокаций равно нулю. Движение каждой дислокации задается уравнением

$$m\frac{\partial X_k^2}{\partial t^2} = b\big[\sigma_0 + \sigma_{xy}^k(vt + w_k; z)\big] + F_{\text{dis}} - B\frac{\partial X_k}{\partial t}. \tag{2}$$

Здесь $k = 1, 2$ — номер движущейся дислокации, m — масса единицы ее длины (для простоты считаем массы дислокаций одинаковыми), B — константа демпфирования, обусловленная фононными, магнонными, электронными либо иными механизмами диссипации, характеризующимися линейной зависимостью силы торможения дислокации от скорости ее скольжения, c — скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле, σ_{xy}^k — компонента тензора напряжений, создаваемых неподвижными дислокациями на линии k-й движущейся дислокации,

$$\sigma_{xy}^k = \sum_{i=1}^{N}\sigma_{xy,i}^k,$$

N — число неподвижных дислокаций в кристалле, F_{dis} — сила взаимодействия дислокаций между собой, которая, согласно [8], определяется формулой

$$F_{\text{dis}} = b^2M\frac{x(x^2 - y^2)}{r^4} \approx -\frac{b^2Mw}{a^2}, \quad M = \frac{\mu}{2\pi(1-\gamma)}, \tag{3}$$

где γ — коэффициент Пуассона. Здесь учтено, что $w \ll a$ (приближение малых колебаний) и $r \approx a$. Две краевые дислокации, расположенные в параллельных плоскостях скольжения одна над другой, представляют линейный гармонический осциллятор. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим эти дислокации в системе, связанной с их центром масс, и запишем для них уравнение движения

$$m\ddot{w}_k = -\frac{b^2M}{a^2}w_k; \quad \ddot{w}_k + \omega_0^2 w_k = 0;$$

$$\omega_0^2 = \frac{b^2M}{a^2m} = \frac{2c^2}{a^2\ln(D/L)} \approx \frac{c^2}{a^2}, \tag{4}$$

где L — длина дислокации, D — величина порядка размеров кристалла. Выполним численную оценку частоты колебаний дислокационного осциллятора. Для значений $v \approx 10^{-2}c \approx 30\,\text{m/s}$, $b \approx 3\cdot 10^{-10}\,\text{m}$, $a \approx 10b \approx 3\cdot 10^{-9}\,\text{m}$ получим $\omega_0 \approx 10^{12}\,\text{s}^{-1}$. Влиянием вязкого торможения, создаваемого фононной подсистемой, на затухание дислокационных колебаний можно пренебречь при выполнении условия $\omega_0 \gg B/m$, которое приближенно можно записать в виде

$$\frac{mc}{a} \gg B. \tag{5}$$

Для значений $m \approx 10^{-15}\,\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}$, $a \approx 10b \approx 3\cdot 10^{-9}\,\text{m}$, $c \approx 3\cdot 10^3\,\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ получим, что это условие выполняется для $B \le 10^{-4}\,\text{Pa}\cdot\text{s}$, т.е. практически при любых значениях константы демпфирования.

Воспользовавшись методами, развитыми ранее в работах [10–13], получим выражение для силы торможения каждой из дислокаций в виде

$$F = b\left\langle\frac{\partial\sigma_{xy}}{\partial X}w\right\rangle = \frac{nb^2}{4\pi m}\int dp_x dp_y|p_x|\big|\sigma_{xy}(p)\big|^2\delta\big(p_x^2v^2 - \omega_0^2\big), \tag{6}$$

где n — плотность неподвижных дислокаций, $\delta(p_x^2v^2 - \omega_0^2)$ — это δ-функция Дирака, отражающая исследуемый механизм диссипации — переход кинетической энергии поступательного движения дислокации в энергию колебаний с частотой ω_0. Далее $\sigma_{xy}(p) = \sigma_{xy}(p_x, p_y, 0)$ — фурье-образ тензора напряжений, создаваемых неподвижной дислокацией, который в данном случае имеет вид (так как от координаты z ничего на зависит, $p_z = 0$)

$$\sigma_{xy}(\mathbf{p}) = \frac{2\mu bi}{1-\gamma}\frac{p_xp_y^2}{p^4}. \tag{7}$$

Символ $\langle\ldots\rangle$ означает усреднение по случайному расположению неподвижных дислокаций в кристалле

$$\langle f(r_i)\rangle = \int_S\prod_{i=1}^{N}f(r_i)\frac{dr_i}{S^N}. \tag{8}$$

Здесь S — площадь сечения кристалла, перпендикулярного линиям дислокаций. При выполнении усреднения в соответствии со стандартной процедурой число дислокаций N и площадь сечения S устремляются к бесконечности, при этом их отношение остается постоянным и равным средней плотности дислокаций. После выполнения преобразований получим выражение для силы динамического торможения движущейся дислокации системой неподвижных дислокаций в следующем виде:

$$F = \frac{nb^4\mu^2}{16m\omega_0(1-\gamma)^2 v} \approx nb^2\mu a\,\frac{c}{v} = n_0\mu a\,\frac{c}{v}. \qquad (9)$$

Здесь $n_0 = nb^2$ — безразмерная плотность закрепленных дислокаций.

Таким образом, сила торможения дислокации, обусловленная рассматриваемым механизмом, обратно пропорциональна скорости дислокационного скольжения, т. е. такая сила не может обеспечить динамической устойчивости дислокационного движения — оно может быть устойчивым лишь при наличии квазивязких сил, например, фононного или магнонного происхождения. Наличие силы (9) приводит к появлению критической скорости, ниже которой стационарное движение дислокации невозможно. Эта скорость определяется из условия $F = Bv$ и равна

$$v_c = \frac{\mu b^2}{4(1-\gamma)}\sqrt{\frac{n}{m\omega_0 B}}. \qquad (10)$$

Результаты и их обсуждение

Выполним численные оценки силы торможения скользящей дислокации неподвижными дислокациями. Возьмем типичные для металлов значения $\mu = 3\cdot 10^{10}\,\mathrm{N\cdot m^{-2}}$, $b \approx 3\cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$. Тогда для значений $n \approx 10^{12}\,\mathrm{m^{-2}}$, $v \approx 10^{-2}c \approx 30\,\mathrm{m/s}$, $a \approx 10b \approx 3\cdot 10^{-9}\,\mathrm{m}$ получим значение силы торможения $F \approx 10^{-4}\,\mathrm{N/m}$. Эта сила торможения сравнивается по порядку величины с квазивязкой силой фононного происхождения при значении константы демпфирования $B \approx 10^{-5}\,\mathrm{Pa\cdot s}$. Для значения $a \approx 100b \approx 3\cdot 10^{-8}$ m получим соответственно $F \approx 10^{-3}$ N/m и $B \approx 10^{-4}\,\mathrm{Pa\cdot s}$.

Отметим отличие данной работы от работ [10,11], в которых также исследовалось скольжение пары краевых дислокаций. В указанных работах использовалась модель струны, уравнение движения содержало вторую производную по координате, дислокации тормозились точечными дефектами — локальными препятствиями, имеющими сферическую симметрию, а механизм торможения заключался в возбуждении изгибных колебаний дислокации, роль дислокационного взаимодействия сводилась к перестойке спектра этих колебаний. В настоящей работе модель струны не используется, производная по координате в уравнении движения отсутствует, торможение осуществляется неподвижными дислокациями — протяженными линейными объектами с цилиндрической симметрией. Именно такая симметрия задачи позволила исследовать новый механизм диссипации, который заключается в возбуждении колебаний дислокационного осцилятора.

Данный механизм диссипации энергии может быть реализован и в том случае, когда одиночная дислокация движется через систему параллельных ей неподвижных дислокационных диполей. В данном случае кинетическая энергия движущейся дислокации переходит в энергию колебаний диполя, который также является линейным гармоническим осциллятором. Перейдя в систему координат, связанную с диполем, легко убедиться, что сила торможения одиночной дислокации параллельными ей дислокационными диполями тоже описывается формулой (9) с той лишь разницей, что в этом случае a — расстояние между дислокациями, образующими диполь, n — плотность диполей [12].

Колебания дислокации относительно центра масс дислокационной пары должны приводить к излучению дислокацией упругих волн, т. е. к радиационному трению. Изучению радиационного трения посвящено значительное количество работ, анализ которых выполнен в обзоре [5], однако в этих работах исследовалась неравномерность движения дислокации, обусловленная скольжением по рельефу Пайерлса. Для корректного решения задачи о радиационном трении, согласно [5], необходимо самосогласованное определение закона движения дислокации с учетом реакции излучения. В нашем случае аналитическое решение такой задачи не представляется возможным, однако для грубой оценки величины радиационного трения можно воспользоваться результатом работы [14], полученным в предположении о том, что все излучение происходит на одной моде. Такое предположение, как было показано авторами [15], эквивалентно гипотезе о малости возмущения, т. е. радиационное трение в этом случае будет малой поправкой к величине торможения дислокационной пары, создаваемой ее взаимодействием с неподвижными дислокациями.

Согласно [14], энергия, излучаемая в единицу времени единицей длины дислокации, колеблющейся с частотой ω, определяется следующим выражением:

$$R = \frac{1}{32}\mu b^2 L^2 k^2 \omega; \quad k = \frac{\omega}{c}. \qquad (11)$$

Здесь L — амплитуда дислокационных колебаний. При этом сила радиационного трения вычисляется по формуле $F_R = R/bv$. В рассматриваемом нами случае для грубой оценки вычислим среднее значение квадрата отклонения дислокации от положения устойчивого равновесия $\langle w^2\rangle$

$$L^2 \approx \langle w^2\rangle \approx n_0 a^2\,\frac{c^2}{v^2}. \qquad (12)$$

Воспользовавшись формулой (11), получим силу радиационного трения дислокации в виде

$$F_R \approx n_0\mu b\left(\frac{b}{a}\right)\left(\frac{c}{v}\right)^3. \qquad (13)$$

Сравним силу торможения (9), возникающую благодаря взаимодействию движущейся дислокации с закрепленными дислокациями, с силой радиационного трения:

$$\frac{F_R}{F} \approx \left(\frac{b}{a}\frac{c}{v}\right)^2. \qquad (14)$$

Формула (13) справедлива при условии $F_R \ll F$, т. е. при

$$\frac{v}{c} \gg \frac{b}{a}. \tag{15}$$

Поскольку используемая в работе модель справедлива для скоростей $c \gg v$, то максимальная допустимая скорость имеет порядок $v \approx 10^{-1}c$, следовательно, выполнение условия (15) возможно лишь для $a \geq 10^2 b$. Оценим порядок величины силы радиационного трения для значений $v \approx 10^{-1}c$, $a \approx 10^2 b$, $\mu = 3 \cdot 10^{10}\,\mathrm{N \cdot m^{-2}}$, $b \approx 3 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$. Тогда при значении плотности неподвижных дислокаций $n \approx 10^{12}\,\mathrm{m^{-2}}$ (т. е. $n_0 \approx 10^{-7}$) получим $F_R \approx 10^{-5}\,\mathrm{N/m}$.

Предложенный механизм торможения может оказывать существенное влияние на характер движения дислокаций, особенно в металлах.

Список литературы

[1] *Логинов Б.М., Проскурин А.Н., Вершинин Е.В.* // ФТТ. 2002. Т. 44. Вып. 10. С. 1799.
[2] *Шпейзман В.В., Николаев В.И., Смирнов Б.И., Лебедев А.Б., Ветров В.В., Пульнев С.А., Копылов В.И.* // ФТТ. 1998. Т. 40. Вып. 9. С. 2621.
[3] *Логинов Б.М., Толстых С.В.* // ФТТ. 1993. Т. 35. Вып. 2. С. 469.
[4] *Нацик В.Д., Миненко Е.В.* // ФТТ. 1970. Т. 12. Вып. 7. С. 2099.
[5] *Альшиц В.И., Инденбом В.Л.* // УФН. 1975. Т. 115. Вып. 1. С. 1.
[6] *Гектина И.В., Лаврентьев Ф.Ф., Старцев В.И.* // ФММ. 1974. Т. 37. С. 1275.
[7] *Петченко А.М., Старцев В.И., Андронов В.М.* Динамика дислокаций. Киев: Наук. думка, 1975. С. 291.
[8] *Косевич А.М.* Дислокации в теории упругости. Киев: Наук. думка, 1978. С. 220.
[9] *Фридель Ж.* Дислокации. М.: Наука, 1967. С. 294–298.
[10] *Малашенко В.В.* // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 6. С. 127.
[11] *Малашенко В.В.* // ФТТ. 2006. Т. 48. Вып. 3. С. 433.
[12] *Малашенко В.В.* // Кристаллография. 2009. Т. 54. № 2. С. 1–4.
[13] *Malashenko V.V., Sobolev V.L., Khudik B.I.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1987. Vol. 143. P. 425.
[14] *Hart E.W.* // Phys. Rev. 1955. Vol. 98. P. 1775.
[15] *Альшиц В.И., Инденбом В.Л., Штольберг А.А.* // ЖЭТФ. 1971. Т. 60. С. 2308.