Экранирование упругого поля дисклинаций дислокационным ансамблем

© Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев

Нижегородский филиал Института машиноведения им. А.А. Благонравова Российской академии наук, 603024 Нижний Новгород, Россия

E-mail: sarafanov@sinn.ru

(Поступила в Редакцию 22 января 2007 г.)

На основе кинетического подхода проведено рассмотрение самосогласованной динамики дислокационного ансамбля в поле дисклинаций. Получены эффективные функции напряжений Эйри для клиновой дисклинации и дисклинационного диполя, учитывающие экранирующий эффект от системы распределенных дислокационных зарядов. Найдены координатные зависимости компонент тензора напряжений и плотности дислокационного заряда для рассмотренных тензора напряжений и плотности дислокационного заряда для рассмотренных экранированных дисклинационных систем. Произведен расчет их упругой энергии.

PACS: 61.72.Lk, 61.72.Bb

1. Введение

На стадии развитой пластической деформации коллективные моды движения дислокаций приводят к возникновению в поле приложенных напряжений крупномасштабных образований с упорядоченным распределением дислокаций. Подобного рода образования получили название мезодефектов [1,2]. Уже в первых работах на эту тему были выявлены и классифицированы наиболее характерные для стадии развитой пластической деформации дислокационные образования, среди которых наиболее типичными мезодефектами оказались оборванные дислокационные границы [3].

Этот результат неоднократно экспериментально проверялся, поскольку классическая теория дефектов кристаллической решетки запрещает существование оборванных границ [4]. Действительно, в равновесных, статических условиях (отожженные кристаллы) оборванные дислокационные границы не наблюдаются. В этой связи возникает вопрос, как энергетически обосновать образование в объеме зерна оборванных субграниц. Исследования показали, что оборванные дислокационные границы формируются в резко неравновесных условиях, в открытых термодинамических системах, каковыми являются кристаллы на стадии развитой пластической деформации [5,6]. Поэтому установить критерии образования субграниц можно лишь в рамках либо последовательного кинетического описания, либо моделей, учитывающих особенности кинетического подхода.

Кристаллографический анализ оборванных границ позволил дать их физическую интерпретацию в терминах теории дефектов реального кристалла. Оказалось, что линейными дефектами, обладающими свойствами оборванных границ, являются частичные дисклинации — дефекты ротационного типа [7,8]. Поэтому проблема описания процессов зарождения и роста оборванных границ оказалась тесно связанной с задачей возникновения и распространения частичных дисклинаций в деформируемом кристалле. Как было впервые показано в работах Рыбина с соавторами [9,10], дисклинации, располагающиеся на стыкующихся границах зерен, играют важнейшую роль в процессе формирования мезоструктуры пластически деформируемых поликристаллов. Своими дальнодействующими полями напряжений они возмущают плотность потока решеточных дислокаций, делают его неоднородным, вызывают коллективные эффекты в ансамбле дислокаций и в конце порождают в прилегающих объемах зерен оборванные дислокационные субграницы — мезодефекты ротационного типа.

Известно, что упругие поля от дисклинаций увеличиваются с расстоянием. В существующих моделях [11,12] экранирование упругого поля дисклинаций достигалось путем учета дисклинаций противоположного знака. Тем самым предполагалось, что в реальных кристаллах дисклинационные системы всегда представляют собой диполи, квадруполи и другие скомпенсированные конфигурации. Однако следует заметить, что, во-первых, экспериментально наблюдаются и не скомпенсированные оборванные границы (ветвящиеся малоугловые границы, субграницы, оканчивающиеся "факелом" из решеточных дислокаций деформированного зерна, и др.) [2]; вовторых, очевидно, что как зарождение, так и движение оборванных субграниц (частичных дисклинаций) в глубь зерна происходит в результате коллективного движения лислокаций.

Поэтому при оценке упругих полей дисклинационных конфигураций более корректно рассматривать их не индивидуально, а при учете вклада окружающих дислокаций, перераспределение которых в упругом поле дисклинаций способно привести к понижению общей упругой энергии системы.

В самом деле, появление дисклинации в границе зерна приводит к возмущению ламинарного потока дислокаций в зерне. В результате в окрестности дисклинации образуется пространственно неоднородное распределение дислокаций. Возникают области с повышенной плотностью дислокационного заряда (избыточной плотности дислокаций одного знака), создающие дальнодействующие поля упругих напряжений, частично компенсирующие упругое поле дисклинации. Иными словами, происходит экранировка поля дисклинации распределенной системой дислокаций и, как следствие, снижение энергии деформируемого кристалла.

Анализу этого вопроса на основе кинетического описания и посвящена настоящая статья, которая является обобщением и развитием работ [13,14].

Самосогласованная динамика дислокационного ансамбля в поле клиновой дисклинации

На развитой стадии пластической деформации, когда плотность дислокаций велика, принципиальным становится учет упругого взаимодействия дислокаций. При этом сущестование "зарядовой" характеристики дислокаций (вектора Бюргерса) обусловливает развитие в дислокационном ансамбле явлений, приводящих к эффекту экранирования дальнодействующего поля [15,16]. В нашем случае для нас важно исследовать самосогласованную динамику ансамбля краевых дислокаций с учетом действия поля дисклинации.

Рассмотрим задачу, когда дисклинация мощности ω , расположенная в начале координат, находится в окружении ансамбля краевых дислокаций.

Сделаем следующие допущения.

1) Будем полагать, что пластическая зона сформирована по одной системе скольжения, иными словами, что дислокации движутся в параллельных системах скольжения в направлении некоторой оси, например 0x ($\mathbf{b}_a \parallel \mathbf{e}_x$). Линии дислокаций направлены по оси 0z. Дислокации в отсутствие дисклинации равномерно распределены на плоскости (x, y).

2) В динамике дислокационного ансамбля участвуют только подвижные краевые дислокации двух типов с векторами Бюргерса разных знаков $(b_a = b_{\pm} = \pm b)$. Неподвижными дислокациями пренебрегаем.

3) Движение дислокаций носит квазивязкий характер.

4) Полагаем, что мощность дисклинации такова, что $D\omega/2 \leq \sigma_e$, т.е. упругие поля от дисклинации лишь возмущают поток дислокаций, вызванный внешним полем σ_e , не приводя дислокации к их остановке (здесь $D = G/2\pi(1-\nu)$, G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона).

При сделанных предположениях для скалярной плотности дислокаций $\rho_a(\mathbf{r}, t)$ справедливы эволюционные уравнения [6,16]

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_a \mathbf{v}_a = \Phi_a(\rho_1, \rho_2 \dots), \tag{1}$$

которые должны быть дополнены уравнениями, учитывающими движение дислокаций в поле упругих сил [16],

$$\mathbf{v}_a(\mathbf{r},t) = \mathbf{V}_a + \hat{M}^a \mathbf{f}_a^{\Sigma}(\mathbf{r},t), \qquad (2)$$

$$\mathbf{f}_{a}^{\Sigma}(\mathbf{r},t) = \mathbf{f}_{a}(\mathbf{r}) - \sum_{c} \int \rho_{c}(\mathbf{r}',t) \nabla W_{ac}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') d\mathbf{r}'.$$
 (3)

Здесь $\mathbf{v}_a(\mathbf{r}, t)$ — средняя скорость скольжения дислокаций, V_a — постоянная составляющая скорости дислокаций, обусловленная напряжением течения σ_e в плоскости скольжения, $f_a(\mathbf{r})$ — сила, действующая на единицу длины дислокации со стороны системы дисклинаций, $\mathbf{f}_{a}^{\Sigma}(\mathbf{r},t)$ — суммарная сила, действующая со стороны системы дисклинаций и распределенных дислокационных зарядов, \hat{M}^a — тензор подвижности дислокаций, имеющий отличные от нуля диагональные компоненты M^{a}_{\parallel} и M^{a}_{\perp} , которые определяют подвижность дислокаций соответственно в плоскостях скольжения и переползания (в большинстве случаев $M^a_{\parallel} \gg M^a_{\perp}$), $W_{ac}(\mathbf{r})$ энергия упругого взаимодействия двух параллельных краевых дислокаций, характеризуемых векторами **b**_a и $\mathbf{b}_{c}, \Phi_{a}(\rho_{1}, \rho_{2}...)$ — нелинейные функции, определяемые спецификой кинетических механизмов дислокационных реакций и удовлетворяющие условию $\Sigma_a b_a \Phi_a = 0$, выражающему факт сохранения вектора Бюргерса в ходе этих процессов, $\mathbf{r} = (x, y)$ — радиус-вектор.

Система уравнений (1)–(3) допускает стационарное однородное решение $\rho_a = \rho_{0a}$, определяемое из условия $\Phi_a(\rho_1, \rho_2...) = 0$. Суммарный дислокационный заряд дислокационного ансамбля в этом случае в силу закона сохранения вектора Бюргерса равен нулю. Поэтому равно нулю и его среднее значение $\Sigma_a b_a \rho_{0a} = 0$, которое является условием нейтральности дислокационного ансамбля относительно суммарного дислокационного заряда.

Энергию взаимодействия дислокаций удобно выразить через функцию напряжений Эйри краевых дислокаций $\psi_a^e(\mathbf{r})$ [4]

$$W_{ac}(\mathbf{r}) = b_c \,\frac{\partial}{\partial y} \,\psi_a^e(\mathbf{r}) = b_c \,\frac{\partial}{\partial y} \,b_a D y \ln \frac{R}{|\mathbf{r}|},\qquad(4)$$

где R — радиус обрезания упругого поля, определяемый внешними границами, $b_a = \pm b$.

Далее введем новые переменные $\rho = \rho^+ + \rho^-$ и $I = \rho^+ - \rho^-$, определяющие соответственно суммарную и избыточную плотности дислокаций. Сделаем естественное допущение, что в исходной системе существует симметрия относительно знака дислокаций. Тогда для переменных ρ и I стационарное однородное состояние системы ($\rho^+ = \rho^- = \bar{\rho}$) запишется в виде $\rho = 2\bar{\rho} = \rho_0$, I = 0.

В стационарных условиях ($\partial \rho_a / \partial t = 0$) при сделанных предположениях система линеаризованных уравнений самосогласованного поля (1)–(3), отвечающая постановке задачи на определение эффективной функции напряжений Эйри $\psi^{\text{eff}}(\mathbf{r})$ для переменных $\rho(\mathbf{r}, t)$ и $I(\mathbf{r}, t)$,

будет иметь вид

$$(\mathbf{V}\nabla I) = -\frac{1}{\tau_{\rm rel}} \left(\rho - \rho_0\right), \quad (\mathbf{V}\nabla_\rho) - bM_{\parallel}\rho_0 \frac{\partial^3 \psi^{\rm eff}}{\partial x^2 \partial y} = 0, \tag{5}$$

$$\psi^{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + Db \int I(\mathbf{r}')(y - y') \ln \frac{r_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (6)$$

где $\tau_{\rm rel}$ — время релаксации подвижных дислокаций к стационарному состоянию. То обстоятельство, что правые части в (5), (6) принимают указанный вид, связано с симметрией задачи относительно знака дислокаций, использованием приближения $M_{\perp}/M_{\parallel} \ll 1$ и выполнением условия $\Sigma_a b_a \Phi_a = 0$, отражающего факт сохранения вектора Бюргерса при различных дислокационных реакциях и размножении.

Перейдем в (5), (6) к Фурье-компонентам, предваритильно выразив ρ из первого уравнения (5) и подставив во второе. В результате имеем

$$\tau_{\rm rel} V^2 k_x^2 I_{\mathbf{k}} - ibM_{\parallel} \rho_0 k_y k_x^2 b^2 \psi_{\mathbf{k}}^{\rm eff} = 0,$$
$$\mathbf{k}^4 \psi_{\mathbf{k}}^{\rm eff} = 4\pi D\omega + ik_y 4\pi DbI_{\mathbf{k}}.$$
(7)

Откуда находим

$$\psi^{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi D\omega}{|k|^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}}, \quad I(\mathbf{k}) = \frac{ik_y 4\omega b^{-1} r_d^{-2}}{|\mathbf{k}|^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}}.$$
 (8)

Здесь параметр r_d дается выражением

$$r_d^{-2} = \frac{\pi D b^2 \rho_0}{T_{\text{ext}}} = \frac{G b^2 \rho_0}{2(1-\nu)T_{\text{ext}}}$$
(9)

и имеет смысл радиуса экранирования [16], а $T_{\rm ext} = \tau_{\rm rel} V^2 / M_{\parallel} = b \sigma_e \bar{L}$ — представляет собой работу деформации в системе скольжения $(V = M_{\parallel} b \sigma_e, \bar{L} = \tau_{\rm rel} V$ — длина релаксации [16]).

Зная эффективную функцию напряжений Эйри $\psi_{\mathbf{k}}^{\text{eff}}(8)$, можно определить распределение плотности дислокаций в поле дисклинации и компоненты тензора упругих напряжений.

Для избыточной плотности имеем

$$I(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{ik_y 4\omega b^{-1} r_d^{-2}}{|\mathbf{k}|^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k}$$

$$= \frac{\omega}{\pi b r_d^2} \int_0^\infty \frac{\operatorname{sh}(y/r_d)}{\sqrt{k_x^2 + r_d^{-2}}} \exp(-|y| \sqrt{k_x^2 + r_d^{-2}})$$

$$\times \cos k_x x dk_x = I_c \operatorname{sh}(y/r_d) K_0(r/r_d).$$
(10)

Здесь $I_c = \omega/\pi br_d$ и $K_0(r/r_d)$ — функция Макдональда нулевого порядка (или модифицированная функция Бесселя второго рода), которая имеет асимптотические пределы [17],

$$K_0(r/r_d) = \begin{cases} \sqrt{\pi r_d/2r} e^{-r/r_d} + \dots & \text{при } r \gg r_d, \\ -\ln(r/r_d) + \dots & \text{при } r \ll r_d. \end{cases}$$
(11)



Рис. 1. Распределение избыточной плотности дислокаций I(x, y) в поле дисклинации согласно формуле (10) (*a*) и соответствующий график линий равного уровня (*b*). График плотности I(x, y), нормированной на величину $I_c = \omega/\pi br_d$, построен для области [40 $r_d \times 40r_d$].

Для суммарной плотности ρ , согласно (5), получаем

$$\rho = \rho_0 - \bar{L} \frac{\partial I}{\partial x} = \rho_0 \left[1 + \frac{D\omega}{\sigma_e} \operatorname{sh}(y/r_d) \frac{x}{r} K_1(r/r_d) \right].$$
(12)

Здесь $K_1(z) = -K'_0(z)$ — функция Макдональда первого порядка.

Соответствующие распределения плотности дислокаций показаны на рис. 1 и 2. Физически плотность дислокаций ρ является сугубо положительной величиной. Это непосредственно следует из выражения (12) при сделанных выше предположениях ($D\omega/2 \leq \sigma_e$).

Здесь заметим следующее. Нахождение эффективной функции напряжений Эйри $\psi^{\text{eff}}(\mathbf{r})$ нами проведено в приближении самосогласованного поля. Такое приближение было введено в физике плазмы и получило название дебаевского [18]. В кулоновской плазме равновесное распределение заряженных частиц устанавливается в результате их теплового движения (соответственно температура играет роль внешнего параметра, контролирующего процессы релаксации системы к равновесному состоянию). В нашей задаче стационарное состояние дислокационной системы достигается в условиях пластической деформации в результате процессов генерации и аннигиляции дислокаций. Аналогом температуры здесь является работа пластической деформации



Рис. 2. Распределение суммарной плотности дислокаций $\rho(x, y)$ в поле дисклинации согласно формуле (12) (a) и соответствующий график линий равного уровня (b). График плотности $\rho(x, y)$, нормированной на величину ρ_0 , построен при $D\omega = \sigma_e$ для области $[40r_d \times 40r_d]$.

 $T_{\rm ext} \simeq b \sigma_e \bar{L}$, связанная с перемещением дислокации на длину свободного пробега \overline{L} .

Таким образом, для рассматриваемой задачи, следуя логике самосогласованного приближения, можно записать

$$I(\mathbf{r}) = -\rho_0 \frac{U_{\text{eff}}(\mathbf{r})}{T_{\text{ext}}} = -\frac{\rho_0 b}{T_{\text{ext}}} \frac{\partial \psi^{\text{eff}}(\mathbf{r})}{\partial y}, \qquad (13)$$

что также непосредственно следует из (5). Здесь $U^a_{ ext{eff}}(\mathbf{r}) = b_a \partial \psi^{ ext{eff}}(\mathbf{r}) / \partial y$ — энергия взаимодействия отдельной дислокации с самосогласованным упругим полем.

Определим теперь упругие поля напряжений. Используя (10) и (13), найдем сначала производную от функции Эйри

$$\frac{\partial \psi^{\text{eff}}}{\partial y} = -D\omega r_d \operatorname{sh}(y/r_d) K_0(r/r_d).$$
(14)

С учетом (14) находим

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \psi^{\text{eff}}}{\partial y^2}$$

= $-D\omega \Big[\operatorname{ch}(y/r_d) K_0(r/r_d) - \operatorname{sh}(y/r_d) \frac{y}{r} K_1(r/r_d) \Big],$
(15)
$$\sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \psi^{\text{eff}}}{\partial x^2} = -D\omega \operatorname{sh}(y/r_d) \frac{x}{r} K_1(r/r_d).$$
 (16)

$$\sigma_{xy} = -\frac{\partial \psi}{\partial x \partial y} = -D\omega \operatorname{sh}(y/r_d) \frac{x}{r} K_1(r/r_d).$$
(16)

Определим, наконец,

$$\sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \psi^{\text{eff}}}{\partial x^2} = -\frac{4\pi D\omega}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} k_x^2 e^{-ik_x x} dk_x$$
$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos k_y y}{k_y^4 + (2k_x^2 + 4r_d^{-2})k_y^2 + k_x^4} dk_y$$
$$= -D\omega \left[\operatorname{ch}(y/r_d) K_0(r/r_d) + \operatorname{sh}(y/r_d) \frac{y}{r} K_1(r/r_d) \right].$$
(17)

Из полученных выражений (14)-(17) следует, что на расстояниях $x \gg r_d$ упругое поле дисклинации становится очень малым. Поэтому величину r_d можно рассматривать как радиус экранирования упругого поля дисклинации в направлении вектора Бюргерса дислокаций (в направлении 0у упругое поле убывает гиперболически).

3. Экранирование упругого поля дисклинационного диполя

Рассмотрим теперь задачу, когда две клиновые дисклинации мощности ω разного знака, расположенные друг от друга на расстоянии 2a вдоль оси 0x, находятся в окружении ансамбля краевых дислокаций.

Тогда в стационарных условиях при сделанных выше предположениях система линеаризованных уравнений самосогласованного поля (1)-(3), отвечающая постановке задачи на определение эффективной функции напряжений Эйри $\psi^{\text{eff}}(\mathbf{r})$, для рассматриваемого случая будет иметь вид

$$(\mathbf{V}\nabla I) = -\frac{1}{\tau_{\rm rel}} \left(\rho - \rho_0\right),$$
$$(\mathbf{V}\nabla \rho) - bM_{\parallel}\rho_0 \frac{\partial^3 \psi^{\rm eff}}{\partial x^2 \partial y} = 0, \tag{18}$$

$$\psi^{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}) - \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$$

$$+ Db \int I(\mathbf{r}')(y - y') \ln \frac{r_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \, d\mathbf{r}', \quad (19)$$

где $\mathbf{a} = a \mathbf{e}_x$ — вектор смещения дисклинаций из начала координат, 2а — плечо дисклинационного диполя.

Из системы уравнений (18), (19) находим выражения для функции напряжений Эйри и дислокационного заряда в k-представлении

$$\psi^{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \frac{i8\pi D\omega}{|\mathbf{k}|^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}} \sin k_x a,$$
$$I(\mathbf{k}) = -\frac{k_y 8\omega b^{-1} r_d^{-2}}{|\mathbf{k}|^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}} \sin k_x a.$$
(20)



Рис. 3. Распределение избыточной плотности дислокаций I(x, y) в поле дисклинационного диполя согласно формуле (21) (*a*) и соответствующий график линий равного уровня (*b*). График плотности I(x, y), нормированной на величину $I_c = \omega/\pi br_d$, построен для области $[40r_d \times 40r_d]$.

Применяя обратное преобразование Фурье, для избыточной плотности находим

$$I(\mathbf{r}) = -\frac{4\omega b^{-1} r_d^{-2}}{(2\pi)^2} \int \frac{k_y \sin k_x a}{|\mathbf{k}|^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k}$$
$$= I_c \operatorname{sh}(y/r_d) \left[K_0(r_-/r_d) - K_0(r_+/r_d) \right], \qquad (21)$$

где $r_+ = \sqrt{y^2 + (x+a)^2}, r_- = \sqrt{y^2 + (x-a)^2}.$ График зависимости, соответствующий выраже-

нию (21), для расслоения дислокационного заряда дисклинационным диполем показан на рис. 3.

Аналогично, используя (20), находим экранированные упругие поля напряжений дисклинационного диполя

$$\sigma_{xx} = -D\omega \left\{ \operatorname{ch} \frac{y}{r_d} \left[K_0(r_-/r_d) - K_0(r_+/r_d) \right] - \frac{y}{r} \operatorname{sh} \frac{y}{r_d} \left[K_1(r_-/r_d) - K_1(r_+/r_d) \right] \right\}, \quad (22)$$

$$\sigma_{yy} = -D\omega \left\{ \operatorname{ch} \frac{y}{r_d} \left[K_0(r_-/r_d) - K_0(r_+/r_d) \right] - \frac{y}{r} \operatorname{sh} \frac{y}{r_d} \left[K_1(r_-/r_d) - K_1(r_+/r_d) \right] \right\}, \quad (23)$$

$$\sigma_{xy} = -D\omega \operatorname{sh} \frac{y}{r_d} \left[\frac{x-a}{r_-} K_1(r_-/r_d) - \frac{x+a}{r_+} K_1(r_+/r_d) \right].$$
(24)

4. Упругая энергия экранированных дисклинаций

Определим энергию экранированных дисклинационных систем. Энергию упругого поля на единицу длины дефектов для случая плоского деформированного состояния можно вычислить по известной формуле [4]

$$W = \frac{1}{2G} \iint \left[\sigma_{xy}^2 - \sigma_{xx} \sigma_{yy} + \frac{1-\nu}{2} \left(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} \right)^2 \right] dx dy.$$
(25)

Рассмотрим сначала случай одиночной дисклинации. Подставляя (15)–(17) в (25), для энергии экранированной дисклинации W_e для области радиуса R имеем

$$W_{e} = \frac{D^{2}\omega^{2}}{2G} \int_{0}^{R} r dr$$

$$\times \int_{0}^{2\pi} \left[\operatorname{sh}^{2}(y/r_{d})K_{1}^{2}(r/r_{d}) + (1-2\nu)\operatorname{ch}^{2}(y/r_{d})K_{0}^{2}(r/r_{d}) \right] d\varphi$$

$$= \frac{\pi D^{2}\omega^{2}}{2G} \int_{0}^{R} r \left\{ K_{1}^{2}\left(\frac{r}{r_{d}}\right) \left[I_{0}\left(\frac{2r}{r_{d}}\right) - 1 \right] + (1-2\nu)K_{0}^{2}\left(\frac{r}{r_{d}}\right) \left[I_{0}\left(\frac{2r}{r_{d}}\right) + 1 \right] \right\} dr. \quad (26)$$

Как показывают расчеты, основной вклад в интеграл (26) вносят слагаемые, в которых модифицированные функции Бесселя первого $I_0(z)$ и второго $K_{\nu}(z)$ рода можно рассматривать в асимптотическом пределе [17]

$$I_0(2z) = \sqrt{1/4\pi z} e^{2z} + \dots,$$
 при $z \gg 1,$ (27)

$$K_{\nu}(z) = \sqrt{\pi/2z}e^{-z} + \dots,$$
 при $z \gg 1.$ (28)

В этом случае (26) сводится к виду

$$W_{e} \simeq \frac{\pi D^{2} \omega^{2}}{2G} \int_{0}^{R} r \frac{\pi r_{d}}{2r} e^{-2r/r_{d}} \frac{2(1-\nu)}{\sqrt{4\pi r/r_{d}}} e^{2r/r_{d}} dr$$
$$= \frac{\sqrt{\pi}}{4} D \omega^{2} r_{d}^{2} \sqrt{\frac{R}{r_{d}}}.$$
(29)

Полученная зависимость (29) энергии упругого поля экранированной дисклинации от размера области *R* в сопоставлении с численным расчетом показана на рис. 4.

Если сравнить эту энергию с энергией неэкранированной дисклинации $W = D\omega^2 R^2 / 8$ [8], то имеем

$$\frac{W_e}{W} = 2\sqrt{\pi} \left(\frac{r_d}{R}\right)^{3/2}.$$
(30)

Физика твердого тела, 2007, том 49, вып. 10



Рис. 4. Зависимость энергии упругого поля W_e (в единицах $D\omega^2 r_d^2$) экранированной клиновой дисклинации от радиуса R области пластичекой зоны, построенная по приближенной формуле (29) (штриховая линия) и рассчитанная численно (сплошная линия) для интеграла (26).



Рис. 5. Зависимость энергии упругого поля W_e (в единицах $D\omega^2 r_d^2$) экранированного дисклинационного диполя от радиуса R области пластической зоны, построенная по приближенной формуле (31) (штриховая линия) и рассчитанная численно (сплошная линия) для интеграла (25).

Сделаем некоторые оценки. Радиус экранирования r_d , определяемый согласно формуле (9) при типичных значениях параметров деформируемого кристалла ($\rho = 10^{10}$ cm⁻², $\sigma_e = 3 \cdot 10^{-3}$ G, $b = 3 \cdot 10^{-8}$ cm), оказывается равным $r_d \simeq 10^{-5}$ cm [16]. Если за характерный масштаб R взять размер зерна $D = 2\mu$ m, то $W_e/W \sim 3 \cdot 10^{-2}$, если $D = 10\,\mu$ m, то эффект составляет уже $W_e/W \sim 3 \cdot 10^{-3}$. Таким образом, имеет место существенное снижение упругой энергии для дисклинации, экранированной системой избыточных дислокаций, распределенных самосогласованным образом по закону (10).

Рассмотрим теперь энергию экранированного системой дислокаций дисклинационного диполя. Этот случай интересен тем, что дисклинационный диполь уже явля-

Физика твердого тела, 2007, том 49, вып. 10

ется экранированной системой [8]. Поэтому важно выяснить, насколько эффективным является дислокационное экранирование.

Подставляя найденные поля напряжений (22)-(24) в формулу (25) и интегрируя по угловой переменной, с учетом асимптотических разложений (27), (28) при R > a находим

$$\begin{split} W_e &\simeq \frac{\pi D \omega^2 r_d}{2} \\ &\times \int_a^R \exp\left(-\frac{2\sqrt{r^2 + a^2}}{r_d}\right) \left[I_0 \left(\frac{2\sqrt{r^2 + a^2}}{r_d}\right) - I_0 \left(\frac{2r}{r_d}\right) \right] dr \\ &= \frac{\pi D \omega^2 a r_d}{2} \left[\operatorname{efrc}\left(\frac{a}{\sqrt{Rr_d}}\right) + \frac{\sqrt{Rr_d/\pi}}{a} \left(1 - e^{-a^2/Rr_d}\right) \right], \end{split}$$
(31)

где 2a — плечо дисклинационного диполя, а функция efrc(x) — дополнительный интеграл вероятности [17].

Зависимость (31) энергии упругого поля экранированного дисклинационного диполя от размера области R в сопоставлении с численным расчетом показана на рис. 5.

При $R \gg a^2/r_d$ выражение для энергии (31) принимает вид

$$W_e = \frac{\pi D \omega^2 a r_d}{2} \left[1 - \frac{a}{\sqrt{\pi R}} \right],\tag{32}$$

откуда непосредственно следует, что при $R \to \infty$ упругая энергия экранированного дислокационным ансамблем дисклинационного диполя имеет асимптотически конечное максимальное значение $W_e = \pi D \omega^2 a r_d/2$.

Если сравнить эту энергию с упругой энергией неэкранированного дислокациями дисклинационного диполя $W = D\omega^2 a^2 [2\ln(R/2a) + 3]$ [8], то имеем

$$\frac{W_e}{W} = \frac{\pi r_d}{4a\ln(R/2a) + 6a}.$$
(33)

Нетрудно заметить, что даже при значениях $a = 2r_d$ и R/2a = 10 отношение (33) оказывается достаточно малым: $W_e/W \sim 0.1$. Таким образом, экранирование дисклинационного диполя системой дислокаций приводит к понижению энергии упругого поля рассматриваемой системы.

5. Заключение

Из полученных в настоящей работе результатов следует, что дислокационное экранирование оказывается эффективным способом понижения упругой энергии деформируемого кристалла. Такое выгодное энергетическое состояние реализуется как неравновесное состояние в условиях самосогласованного пластического течения в окрестности дисклинаций и при выраженной активной дислокационной кинетике. В исходной постановке рассматриваемая задача решалась в бесконечном пространстве. Но то обстоятельство, что характерный масштаб r_d спадания упругого поля достаточно мал (за исключением луча в направлении, перпендикулярном системе скольжения), позволяет предположить, что полученный результат, связанный с эффектом экранирования упругого поля дисклинационных систем, остается справедливым и для конечной области. Для случая одиночной дисклинации это было показано на основе численного анализа в работе [14].

Список литературы

- [1] В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. Металлургия, М. (1986). 224 с.
- [2] В.В. Рыбин. Вопр. материаловедения 32, 11 (2002).
- [3] А.Н. Вергазов, В.А. Лихачев, В.В. Рыбин. ФММ 42, 146 (1976).
- [4] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 599 с.
- [5] M. Seefeldt. Rev. Adv. Mater. Sci. 2, 44 (2001).
- [6] Г.А. Малыгин. УФН 169, 979 (1999).
- [7] В.В. Рыбин, Н.Ю. Золоторевский, И.М. Жуковский. ФММ 69, 5 (1990).
- [8] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклинации в кристаллах. Наука, Л. (1986). 224 с.
- [9] В.Н. Перевезенцев, В.В. Рыбин. Поверхность 10, 134 (1982).
- [10] В.В. Рыбин, А.А. Зисман, Н.Ю. Золоторевский. ФТТ 27, 181 (1985).
- [11] Т.С. Орлова, А.Е. Романов, А.А. Назаров, Н.А. Еникеев, И.В. Александров, Р.З. Валиев. Письма в ЖТФ 31, 46 (2005).
- [12] Т.С. Орлова, А.А. Назаров, Н.А. Еникеев, И.В. Александров, Р.З. Валиев, А.Е. Романов. ФТТ 47, 820 (2005).
- [13] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. Письма в ЖТФ 31, 73 (2005).
- [14] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. Письма в ЖТФ **32**, 35 (2006).
- [15] Ш.Х. Ханнанов. ФММ 78, 31 (1994).
- [16] Г.Ф. Сарафанов. ФТТ 39, 1575 (1997).
- [17] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Наука, М. (1971). 1108 с.
- [18] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1976). 584 с.