10,07

Эффект экранирования дислокационным ансамблем упругого поля дисклинации, расположенной на границе двух полупространств

© Г.Ф. Сарафанов[1], Ю.Г. Шондин[2]

[1] Нижегородский филиал Института машиноведения им. А.А.Благонравова РАН,
Нижний Новгород, Россия
[2] Нижегородский педагогический государственный университет,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: gf.sarafanov@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 8 февраля 2012 г.
В окончательной редакции 16 апреля 2012 г.)

Рассмотрена самосогласованная динамика дислокационного ансамбля в упругом поле дисклинации, расположенной на границе двух полупространств, для двух случаев: полупространств с разной плотностью подвижных дислокаций и бикристалла, где в одном полупространстве отсутствуют дислокации. Проведен расчет упругой энергии W экранированной дислокационным ансамблем дисклинации в зоне, имеющей форму прямоугольника, центрированного относительно дисклинации. Показано, что W увеличивается как $\sim \sqrt{R}$ (R — поперечный размер зоны в пластически деформируемом полупространстве).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-02-00508-а).

1. Введение

Как показано в работах [1,2], в процессе пластического течения в границах и стыках зерен образуются дефекты ротационного типа — дисклинации, играющие важнейшую роль в дальнейшей эволюции структуры деформируемых поликристаллов. Своими дальнодействующими полями напряжений они модулируют поток решеточных дислокаций, вызывая расслоение их однородного распределения и порождая в прилегающих объемах зерен оборванные дислокационные субграницы, а также более сложные дислокационные образования (мезодефекты ротационного типа) [3,4].

Важно подчеркнуть, что как зарождение, так и движение оборванных субграниц в глубь зерна происходят в результате коллективного движения дислокаций. Поэтому при расчете упругих полей и энергии формирующихся дисклинационных конфигураций необходимо учитывать вклад окружающих дислокаций, перераспределение которых в упругом поле дисклинаций способно, как было показано в [5], существенно понизить общую упругую энергию системы. В [5,6] исходная краевая задача была сформулирована для функции напряжений Эйри $\psi(\mathbf{r})$, которая, будучи определенной во всем пространстве, удовлетворяет бигармоническому уравнению

$$\Delta^2\psi(\mathbf{r}) = -4r_d^{-2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(\mathbf{r}) + 4\pi D\omega\delta(\mathbf{r}), \tag{1}$$

в котором первое слагаемое в правой части является распределенным в пространстве дислокационным источником упругого поля, самосогласованно связанным с функцией $\psi(\mathbf{r})$, а второе — дисклинационным источником. При этом дислокации, формирующие пластическую зону, характеризуются плотностью $\rho_a(\mathbf{r}, t)$, вектором Бюргерса $\mathbf{b}_a$ в направлении скольжения дислокаций $0x$ ($\mathbf{b}_a \parallel \mathbf{e}_x$) и обладают нулевым суммарным вектором Бюргерса [7]. Здесь a — индекс, принимающий значение плюс или минус и характеризующий дислокации с соответствующим знаком модуля вектора Бюргерса ($b_a = \pm b$).

Проведенный в [5,8] анализ экранировки упругого поля клиновой дисклинации системой дислокаций в случае бесконечно протяженного пластически деформируемого кристалла показал, что упругая энергия такой системы в области размера R определяется выражением

$$W = \frac{\sqrt{\pi}}{4}D\omega^2 r_d^2\sqrt{\frac{R}{r_d}}, \tag{2}$$

где r_d — радиус экранирования упругого поля [5,7], $D = G/2\pi(1-\nu)$, ω — мощность дисклинации, G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона.

Настоящая работа посвящена обобщению результатов работ [5,8] на случай, когда дисклинация расположена на границе двух полупространств, для двух вариантов: полупространств с разной плотностью подвижных дислокаций и бикристалла, где в одном полупространстве отсутствуют дислокации.

2. Эффект экранирования упругого поля дисклинации, расположенной на границе двух пластически деформированных полупространств с разной плотностью подвижных дислокаций

Здесь рассматривается эффект экранирования упругого поля дисклинации, расположенной на границе двух

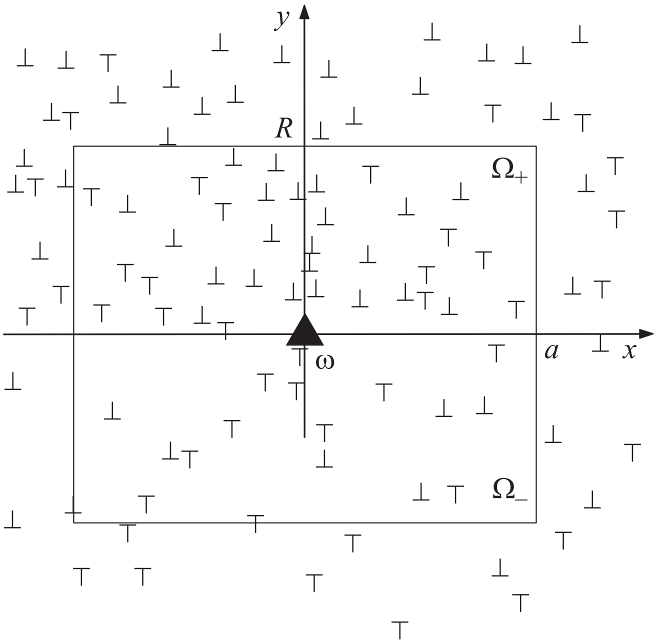

Рис. 1. Две смежные области одной системы скольжения с разными радиусами экранирования ($r_1, r_2 < \infty$), на границе которых расположена дисклинация мощности ω.

полупространств (рис. 1), характеризующихся различными параметрами радиуса экранирования r_d (r_1 и r_2). Физически это обусловлено тем, что плотность подвижных дислокаций в двух смежных областях различна [7,8].

Рассматриваемая граничная задача сопряжения определяется уравнениями [6]

$$\Delta^2\psi_+(x,y) = 4\beta_1^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi_+(x,y) + \gamma\delta(x)\delta(y), \quad y > 0,$$

$$\Delta^2\psi_-(x,y) = 4\beta_2^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi_-(x,y), \qquad y < 0 \quad (3)$$

и условиями сшивки на границе $y = 0$

$$\frac{\partial^j}{\partial y^j}\psi_+(x,y)|_{y=0} = \frac{\partial^j}{\partial y^j}\psi_-(x,y)|_{y=0}, \quad j = 0, 1, 2, 3. \quad (4)$$

Здесь введены следующие обозначения: $\beta_i = \frac{1}{r_i}$ $(i = 1, 2)$, $\gamma = 4\pi D\omega$.

Решаем задачу (3), (4) методом преобразования Фурье по x

$$\tilde\psi_\pm(k,y) = \int e^{-ikx}\psi_\pm(x,y)dx,$$

тогда (3) преобразуется к виду

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} - k^2\right)^2\tilde\psi_+(x,y) = 4\beta_1^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\tilde\psi_+(x,y) + \gamma\delta(y - y_0), \qquad y > 0,$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} - k^2\right)^2\tilde\psi_-(x,y) = 4\beta_2^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\tilde\psi_-(x,y), \quad y < 0. \quad (5)$$

Определим числа λ_i и μ_i $(i = 1, 2)$ по формулам

$$\lambda_{1,2} = \pm\beta_1 - \sqrt{k^2 + \beta_1^2}, \quad \mu_{1,2} = \pm\beta_2 + \sqrt{k^2 + \beta_2^2}.$$

Решения исходной краевой задачи (3), (4) получаются из найденных функций $\tilde\psi_\pm(k,y)$ с помощью обратного преобразования Фурье

$$\psi_\pm(x,y) = \frac{1}{2\pi}\int e^{ikx}\tilde\psi_\pm(k,y)dk.$$

Далее нас будет интересовать поведение $\psi_\pm(x,y)$ и ее производных при больших значениях аргументов. Такое поведение вполне определяется поведением Фурье-компонент $\tilde\psi_\pm(k,y)$ при $k \to 0$.

В этом случае выражения для $\tilde\psi_\pm$ можно представить как

$$\tilde\psi_+(k,y) = \psi_+^1(k)e^{\lambda_1 y} + \psi_+^2(k)e^{\lambda_2 y}, \quad y > 0, \qquad (6)$$

$$\tilde\psi_-(k,y) = \varphi_-^1(k)e^{\mu_1 y} + \varphi_-^2(k)e^{\mu_2 y}, \quad y < 0, \qquad (7)$$

где

$$\psi_+^1(k) \sim \frac{\gamma}{2(\beta_1 + \beta_2)k^2}, \quad \psi_+^2(k) = O(1), \qquad (8)$$

т.е. функция $\psi_+^1(k)$ сингулярна, а $\psi_+^2(k)$ регулярна в точке $k = 0$.

В выражении (7) сингулярной при $k = 0$ будет функция $\varphi_-^2(k)$, а $\varphi_-^1(k)$ — регулярной:

$$\varphi_-^1(k) = O(1), \quad \varphi_-^2(k) \sim \frac{\gamma}{2(\beta_1 + \beta_2)k^2}. \qquad (9)$$

Отсюда, в частности, следует, что функции $\partial\psi_\pm(x,y)/\partial y$ при фиксированном y экспоненциально убывают при $|x| \to \infty$; при фиксированном x ведут себя как $O\left(\frac{1}{\sqrt{y}}\right)$ при $|y| \gg \{r_1, r_2\}$.

Далее произведем вычисление энергии упругого поля области кристалла в виде выбранного прямоугольника $\Omega = \left\{\begin{matrix} -a \le x \le a \\ -R \le y \le R \end{matrix}\right\}$ и $\Omega_+ = \Omega|_{y>0}$, $\Omega_- = \Omega|_{y<0}$ (рис. 1).

Используем выражение для энергии упругого поля в виде [9]

$$W = \frac{1}{2G}\iint_\Omega(\sigma_{xy}^2 - \sigma_{xx}\sigma_{yy})dxdy + \frac{1-\nu}{4G}\iint_\Omega(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})^2dxdy, \qquad (10)$$

где компоненты тензора напряжений определятся согласно формулам [9]

$$\sigma_{xy} = -\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}, \quad \sigma_{xx} = \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}, \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}.$$

Первое слагаемое с помощью интегрирования по частям приводится к сумме интегралов по сторонам прямоугольной области

$$W_{\text{gr}} \equiv \frac{1}{2G} \iint_\Omega \left(\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \right)^2 - \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) dx dy$$

$$= \frac{1}{2G} \int_{-R}^{R} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \Big|_{x=-a}^{x=a} dy$$

$$- \frac{1}{2G} \int_{-a}^{a} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \Big|_{y=-R}^{y=R} dx. \qquad (11)$$

В результате формула для энергии принимает следующий вид:

$$W = W_{\text{gr}} + \frac{1-\nu}{4G} \iint_\Omega \left(\Delta\psi(x,y) \right)^2 dx dy. \qquad (12)$$

При $a, R \gg r_1, r_2$ первое слагаемое W_{gr}, согласно (11), оценивается как

$$W_{\text{gr}} = \text{const} + O\left(\frac{1}{\sqrt{R}} \right),$$

а второе слагаемое в (12) — как

$$\frac{1-\nu}{4G} \iint_\Omega \left(\Delta\psi(x,y) \right)^2 dx dy \sim \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\sqrt{r_1} + \sqrt{r_2}}{(r_1 + r_2)^2} \times (r_1 r_2)^{3/2} D\omega^2 \sqrt{R}. \qquad (13)$$

Здесь при вычислениях использовался метод преобразований Фурье с учетом полученных выше асимптотик для функций $\tilde{\psi}_\pm(k, y)$ (8), (9).

Следовательно, при достаточно больших a и R основной вклад в энергию дисклинации вносит второе слагаемое в (10), и

$$W \simeq \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\sqrt{r_1} + \sqrt{r_2}}{(r_1 + r_2)^2} (r_1 r_2)^{3/2} D\omega^2 \sqrt{R}. \qquad (14)$$

Здесь R — поперечный размер деформируемых областей вдоль оси x.

Рассмотрим интересный факт: при $r_1 = r_2 = r_d$ формула (14) переходит в формулу (2), полученную непосредственным интегрированием точного выражения плотности упругой энергии экранированной дисклинации для круговой области пластической зоны. Тот факт, что конечный результат справедлив как для круга радиуса R, так и для данного случая с характерным поперечным размером пластических областей R, указывает на то, что имеет место сильное экранирование в направлении скольжения дислокаций. Поэтому зависимость энергии W при $a \gg r_d$ не проявляется.

3. Эффект экранирования упругого поля дисклинации, расположенной на границе зерна в бикристалле

В предыдущем разделе обсуждался случай экранирования упругого поля дисклинации дислокационным ансамблем, характеризующимся различными парамет-

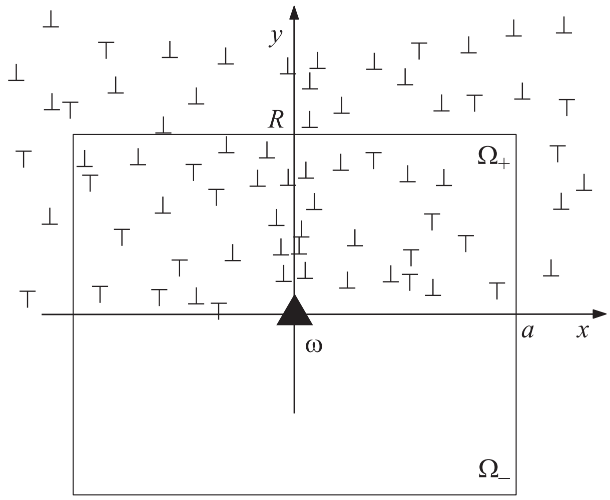

Рис. 2. Бикристалл, состоящий из упругой области ($y < 0$) и пластически деформированной области ($y > 0$). В бикристалле на межкристаллитной границе расположена дисклинация мощности ω.

рами радиуса экранирования r_d (r_1 и r_2) для двух смежных областей. Здесь рассматривается более специальный случай, когда $r_2 = \infty$, т.е. когда в одной из смежных областей имеется лишь упругое поле. В такой постановке мы имеем в общем случае бикристалл, в котором пластическая деформация развивается вдоль межкристаллитной границы (рис. 2). Требуется определить, как сказывается пластическая деформация в одном из зерен на энергии упругого поля бикристалла в целом и кристаллитов в отдельности.

Итак, по-прежнему $\gamma = 4\pi D\omega$, но теперь $\beta_1 = \frac{1}{r_1} = \frac{1}{r_d}$, $\beta_2 = \frac{1}{r_2} = 0$.

Тогда граничная задача сопряжения определяется уравнениями

$$\Delta^2 \psi_+(x,y) = 4\beta_1^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi_+(x,y) + \gamma\delta(x)\delta(y), \quad y > 0,$$

$$\Delta^2 \psi_-(x,y) = 0, \qquad y < 0 \qquad (15)$$

и граничными условиями сшивки на границе $y = 0$ (4).

Как и в предыдущем случае, решаем задачу методом преобразования Фурье по x

$$\tilde{\psi}_\pm(k,y) = \int e^{-ikx} \psi_\pm(x,y) dx,$$

тогда (15) преобразуется к виду

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} - k^2 \right)^2 \tilde{\psi}_+(x,y) = 4\beta_1^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \tilde{\psi}_+(x,y) + \gamma\delta(y - y_0), \quad y > 0,$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} - k^2 \right)^2 \tilde{\psi}_-(x,y) = 0, \quad y < 0. \qquad (16)$$

Определим, как и в предыдущей задаче, собственные числа

$$\lambda_{1,2} = \pm\beta_1 - \sqrt{k^2 + \beta_1^2}.$$

Решения исходной граничной задачи (15), получаются из найденных функций $\tilde{\psi}_\pm(k, y)$ с помощью обратного преобразования Фурье

$$\psi_\pm(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int \mathrm{e}^{ikx} \tilde{\psi}_\pm(k, y) dk.$$

Рассмотрим поведение функций $\tilde{\psi}_\pm(k, y)$ при $k \to 0$. В этом случае эти функции удовлетворяют уравнениям

$$\tilde{\psi}_+(k, y) = \psi_+^1(k)\mathrm{e}^{\lambda_1 y} + \psi_+^2(k)\mathrm{e}^{\lambda_2 y}, \quad y > 0, \qquad (17)$$

$$\tilde{\psi}_-(k, y) = \varphi_-^1(k)\mathrm{e}^{\mu_1 y} + \varphi_-^2(k)\mathrm{e}^{\mu_2 y}, \quad y < 0, \qquad (18)$$

где

$$\psi_+^1(k) \sim \frac{\gamma}{2\beta_1 k^2}, \quad \psi_+^2(k) = O(1), \qquad (19)$$

т.е. функция $\psi_+^1(k)$ — сингулярна, а $\psi_+^2(k)$ регулярна при $k \to 0$.

В выражении (18) функции $\varphi_-^{1,2}(k)$ при $k \to 0$ ведут себя следующим образом:

$$\varphi_-^1(k) \sim \frac{\gamma}{2\beta_1 k^2}, \quad \varphi_-^2(k) \sim -\frac{\gamma}{2\beta_1 |k|}. \qquad (20)$$

Из (19) и (20) следует, что $\partial\tilde{\psi}_\pm(k, y)/\partial y$ — непрерывные и непрерывно-дифференцируемые по k функции. Отсюда, совершая преобразования Фурье, получаем, что функция $\partial\psi_+(x, y)/\partial y$ при фиксированном y убывает при $|x| \to \infty$ по крайней мере как $|x|^{-1}$, а при фиксированном x ведет себя как $O(y^{-1/2})$ при $|y| \gg \{r_1\}$. Функция $\partial\psi_-(x, y)/\partial y$ при фиксированном y убывает при $|x| \to \infty$ по крайней мере как $|x|^{-1}$, а при фиксированном x ведет себя как $O(1)$ при $|y| \gg \{r_1\}$.

Проведем вычисление энергии упругого поля области бикристалла в виде прямоугольника (рис. 2) аналогично предыдущему случаю.

Воспользуемся формулой (12) и оценим сначала вклад „объемной энергии“, описываемой вторым слагаемым. Соответствующий интеграл по прямоугольнику Ω разбиваем на сумму двух интегралов по прямоугольникам $\Omega_\pm$. Интеграл по Ω_+ оценивается, как и в рассмотренной выше задаче (см. (13) формулу), только теперь мы учитываем, что $r_2 = \infty$, и получаем при $a, R \gg r_1$

$$\frac{1-\nu}{4G} \iint\limits_{\Omega_+} (\Delta\psi(x, y))^2 dx dy \sim \frac{\sqrt{\pi}}{2} r_1^{3/2} D\omega^2 \sqrt{R}. \qquad (21)$$

Для аналогичного интеграла по прямоугольнику Ω_- в асимптотической области получаем

$$\frac{1-\nu}{4G} \iint\limits_{\Omega_-} (\Delta\psi(x, y))^2 dx dy \sim D\omega^2 r_1^2 \ln \frac{R}{r_1} + O(1). \qquad (22)$$

Таким образом, при $a, R \gg r_1$ второе слагаемое в (12) представляет собой сумму выражений (21) и (22), из которых основной вклад вносит интеграл по области Ω_+. Слагаемое W_{gr} в выражении для энергии (12) вычисляется по формуле (11). В этой формуле вклад интегралов в верхней полуплоскости оценивается как

$$W_{\mathrm{gr}}(y > 0) = \mathrm{const} + O\left(\frac{1}{\sqrt{R}}\right).$$

Вклады соответствующих интегралов в нижней полуплоскости при условии $a, R \gg r_1$ и $\frac{R}{a} = \mathrm{const}$ оценива-

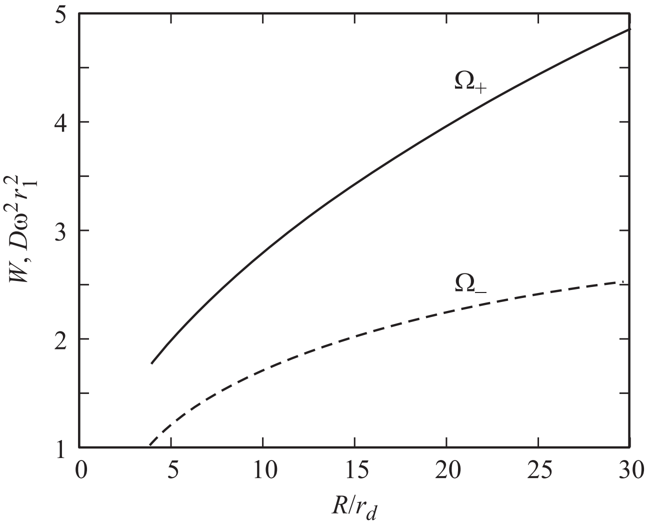

Рис. 3. Зависимость упругой энергии для верхней пластически деформируемой области Ω_+ и упругой области Ω_- от величины R/r_d.

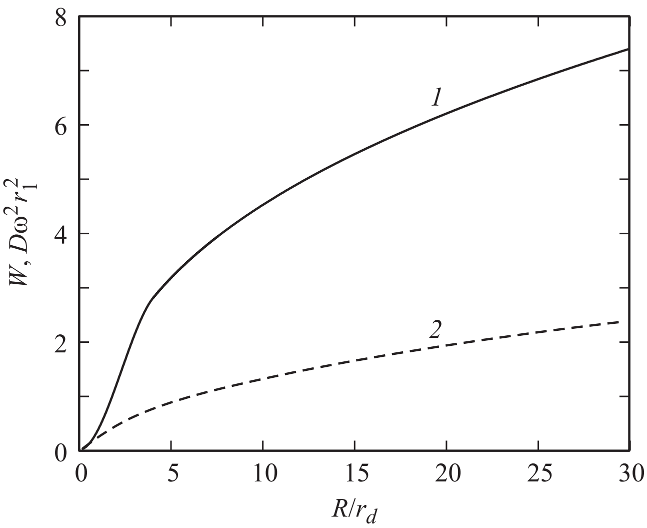

Рис. 4. Зависимость упругой энергии бикристалла для всей области прямоугольника Ω (включающего подобласти верхней Ω_+ и нижней Ω_- его половины) (*1*) и зависимость энергии однородно пластически деформируемого прямоугольника той же геометрии (*2*) от величины R/r_d.

ются следующим образом:

$$\frac{1}{2G}\int_{-a}^{a}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\Big|_{y=-R}dx = O(1),$$

$$\frac{1}{2G}\int_{-R}^{0}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}\ \frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\Big|_{x=-a}^{x=a}dy = -\frac{D\omega^2 r_1^2}{\pi(1-\nu)}$$
$$\times\frac{a}{R(1+a^2/R^2)^3}\ln\frac{R}{r_1}+O(1). \qquad (23)$$

Отсюда асимптотика слагаемого W_{gr} в выражении для энергии определяется в основном логарифмической зависимостью

$$W_{\mathrm{gr}} = -\frac{D\omega^2 r_1^2}{\pi(1-\nu)}\frac{a}{R(1+a^2/R^2)^3}\ln\frac{R}{r_1}+O(1). \qquad (24)$$

Отметим, что $\frac{a}{R(1+a^2/R^2)^3}\leq\frac{1}{2}$; следовательно, коэффициент перед логарифмом в (24) не превышает величины $\frac{D\omega^2 r_1^2}{2\pi(1-\nu)}$, т.е. примерно в 4 раза меньше соответствующего вклада от нижней полуплоскости в „объемную энергию". Из приведенных формул следует, что при $a, R \gg r_1$ и $a\sim R$ основной вклад в энергию дисклинации вносит второе слагаемое (10), а с учетом граничных эффектов в итоге имеем

$$W = W\big|_{\Omega_+}+W\big|_{\Omega_-}\simeq\frac{\sqrt{\pi}}{2}D\omega^2 r_1^2\sqrt{\frac{R}{r_1}}+\frac{3}{4}D\omega^2 r_1^2\ln\frac{R}{r_1}. \qquad (25)$$

Зависимости упругой энергии от размера R, нормированного на величину радиуса экранирования r_d, в областях бикристалла показаны на рис. 3 и 4.

Зависимость упругой энергии бикристалла от R (рис. 4) построена путем сшивки двух асимптотик, найденных при $R\ll r_d$ и $R\gg r_d$.

4. Выводы

Во-первых, показано, что упругое поле недеформированной области бикристалла эффективно экранируется пластической деформацией, протекающей в соседнем зерне (рис. 3).

Во-вторых, сравнивая энергию упругого поля бикристалла (рис. 4) и упругую энергию однородно пластически деформируемого прямоугольника той же геометрии с дисклинацией в центре области, можно заметить, что энергия экранированной дисклинации в бикристалле с одним недеформированным зерном примерно в 3 раза превышает энергию деформированного кристалла того же поперечного размера. Этот факт можно использовать для оценок.

Список литературы

[1] В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. Металлургия, М. (1986). 224 с.
[2] В.В. Рыбин, А.А. Зисман, Н.Ю. Золоторевский. ФТТ **27**, 181 (1985).
[3] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклинации в кристаллах. Л. (1986). 224 с.
[4] D.A. Hughes, N. Hansen. Acta. Mater. **45**, 3871 (1997).
[5] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. Письма в ЖТФ **31**, *21*, 73 (2005).
[6] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. Письма в ЖТФ **32**, *18*, 35 (2006).
[7] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. ФТТ **39**, 1575 (2007).
[8] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. ФТТ **49**, 1780 (1997).
[9] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 599 с.