05

Эффект экранирования упругого поля дисклинации системой дислокаций

© Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев

Нижегородский филиал Института машиноведения
им. А.А. Благонравова РАН
E-mail: sarafanov@sinn.ru, pevn@uic.nnov.ru

Поступило в Редакцию 20 июня 2005 г.

Построена эффективная функция напряжений Эйри дисклинации, учитывающая экранирующий эффект от системы распределенных дислокационных зарядов. Найдены координатные зависимости компонент тензора напряжений экранированной дисклинации и плотности дислокационного заряда. Произведен расчет упругой энергии экранированной дисклинации.

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 [1–3]. 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 [4]. С теоретической точки зрения необходимо понять, почему формирование в объеме зерна такого рода границ энергетически выгодно. Актуальность этого вопроса связана с тем, что классическая теория дефектов кристаллической решетки запрещает существование оборванных дислокационных границ [5,6].

Согласно [7,8], оборванные субграницы можно интерпретировать во многих случаях как частичные дисклинации. Известно, что упругие поля от дисклинаций увеличиваются с расстоянием. В существующих моделях [8,9] 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: во-первых, экспериментально наблюдаются и не скомпенсированные оборванные границы (ветвящиеся малоугловые границы, субграницы, оканчивающиеся „факелом“ из решеточных дислокаций деформированного зерна и др.) [2]; во-вторых, очевидно, что как зарождение, так и движение оборванных субграниц (частичных дисклинаций) в глубь зерна происходит в результате коллективного движения дислокаций.

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. Анализу этого вопроса и посвящена настоящая работа.

Рассмотрим задачу, когда клиновая дисклинация, расположенная в начале координат, находится в окружении ансамбля краевых дислокаций, осуществляющих пластическую деформацию в поле внешних напряжений σ_e. Дислокации характеризуются плотностью $\rho_a(\mathbf{r}, t)$, вектором Бюргерса b_a в направлении скольжения дислокаций $0_x(\mathbf{b}_a \parallel \mathbf{e}_x)$ и обладают нулевым суммарным вектором Бюргерса $\sum_a b_a\rho_{a0} = 0$ ($\rho_{a0} = \rho_0/2$ — однородное распределение дислокаций в поле заданных внешних напряжений σ_e, $a = \pm$).

Тогда суммарное упругое поле от дисклианции и ансамбля дислокаций определяется эффективной функцией напряжений Эйри

$$\psi^{\Sigma}(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \sum_a \int \rho_a(\mathbf{r}')\psi_a^e(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)d\mathbf{r}'$$

$$= \psi(\mathbf{r}) + Db \int I(\mathbf{r}')(y-y')\ln\frac{r_0}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,dr', \qquad (1)$$

где $\psi(\mathbf{r}) = D\omega/2(r^2\ln(r/R) - r^2/2)$ — функция напряжений Эйри клиновой дисклинации [8], R — радиус обрезания упругого поля (например, характерный размер кристалла), ω — мощность дисклинации, $\psi_a^e(\mathbf{r}) = -b_a Dy\ln(r/r_0)$ — функция напряжений Эйри краевой дислокации [5], $I(\mathbf{r}) = \rho_+(\mathbf{r}) - \rho_-(\mathbf{r})$ — избыточная плотность дислокаций (дислокационный заряд), $D = G/2\pi(1-\nu)$, G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона.

Последовательное рассмотрение вопроса, связанное с нахождением эффективной функции напряжений Эйри $\psi^{\Sigma}(\mathbf{r})$, возможно в приближении самосогласованного поля. Такое приближение введено было в физике плазмы и получило название дебаевского [10]. Для этого приближения характерно то, что в состоянии термодинамического равновесия электроны (e) и ионы (i) в самосогласованном поле $(U_{eff} = e\varphi_{eff})$ распределены по формуле Больцмана. Причем в условиях электронейтральности $(n_{0e} = n_{0i} = n_0/2)$ для заряженных частиц имеет место соотношение $(n_i - n_e)/n_0 = \mathrm{sh}(-e\varphi_{eff}/kT) \simeq -U_{eff}/kT$, характеризующее данное приближение [10].

В кулоновской плазме, где равновесное распределение заряженных частиц устанавливается в результате их теплового движения (соответственно температура играет роль внешнего паарметра, контролирующего процессы релаксации системы к равновесному состоянию). В нашей задаче стационарное состояние дислокационной ситемы достигается в условиях пластической деформации в результате процессов генерации и аннигиляции дислокаций. Аналогом температуры здесь является работа пластической деформации $T_{\mathrm{ext}} \simeq b\sigma_e\overline{L}$, связанная с перемещением дислокации на длину свободного пробега $\overline{L}$.

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

$$I(\mathbf{r}) = -\rho_0 \frac{U_{eff}(\mathbf{r})}{T_{\mathrm{ext}}} = -\frac{\rho_0 b}{T_{\mathrm{ext}}} \cdot \frac{\partial \psi^{\Sigma}(\mathbf{r})}{\partial y}. \tag{2}$$

Здесь $U^a_{eff}(\mathbf{r}) = b_a \partial \psi^{\sum}(\mathbf{r})/\partial y$ — энергия взаимодействия отдельной дислокации с самосогласованным упругим полем.

Переходя в (1) и (2) к фурье-компонентам, находим

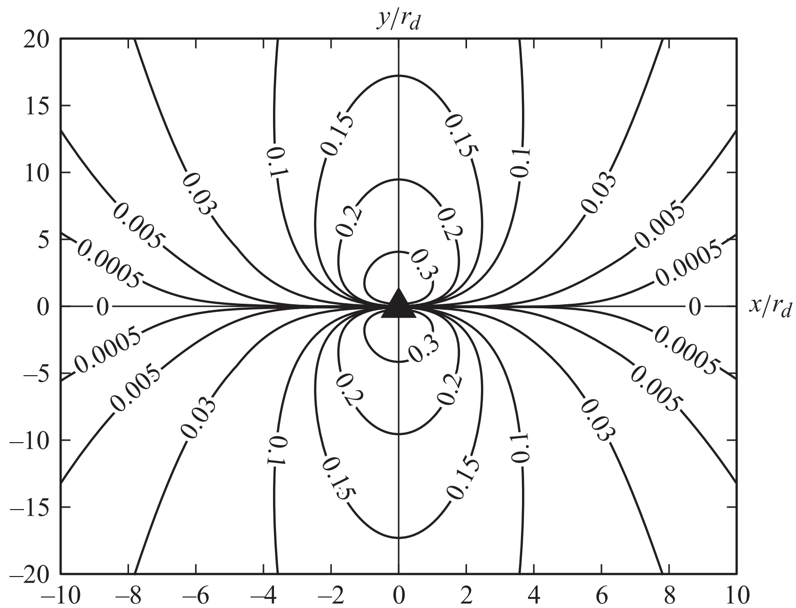
$$\psi^{\Sigma}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi D\omega}{|\mathbf{k}|^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}}, \qquad I(\mathbf{k}) = \frac{ik_y 4\omega b^{-1} r_d^{-2}}{|\mathbf{k}|^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}}, \tag{3}$$

где $r_d^{-2} = \pi\rho_0 b^2 D/T_{ext}$.

Из (3) можно теперь определить стационарное пространственное распределение дислокационного заряда (см. рисунок) в поле дисклинации

$$I(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{ik_y 4\omega b^{-1} r_d^{-2}}{|\mathbf{k}|^4 + 4k_y^2 r_d^{-2}} e^{-i\mathbf{kr}} d\mathbf{k} = I_e \mathrm{sh}(y/r_d) K_0(r/r_d). \tag{4}$$

Здесь $I_c = \omega/\pi b r_d$ и $K_0(r/r_d)$ — функция Макдональда нулевого порядка [11].



Стационарное пространственное распределение нормированной избыточной плотности дислокаций $I(x,y)/I_c$ в поле дисклинации, расположенной в начале координат. Максимальное значение дислокационного заряда $I = \pm 0.5 I_c$ достигается при значениях $x = 0$, $y = \pm 0.8 r_d$.

Далее, применяя обратное преобразование Фурье, находим с учетом известной функции $\psi^\Sigma(\mathbf{k})$ компоненты тензора напряжений рассматриваемой системы дефектов

$$\sigma_{yy}^\Sigma(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2 \psi^\Sigma(\mathbf{r})}{\partial x^2} = -D\omega \left[\mathrm{ch}(y/r_d) K_0(r/r_d) + \mathrm{sh}(y/r_d) \frac{y}{r} K_1(r/r_d) \right], \quad (5)$$

$$\sigma_{xx}^\Sigma(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2 \psi^\Sigma(\mathbf{r})}{\partial y^2} = -D\omega \left[\mathrm{ch}(y/r_d) K_0(r/r_d) - \mathrm{sh}(y/r_d) \frac{y}{r} K_1(r/r_d) \right], \quad (6)$$

$$\sigma_{xy}^\Sigma(\mathbf{r}) = -\frac{\partial^2 \psi^\Sigma(\mathbf{r})}{\partial x \partial y} = -D\omega \mathrm{sh}(y/r_d) \, \frac{x}{r} \, K_1(r/r_d). \quad (7)$$

Здесь $K_1(z) = -K_0'(z)$ — функция Макдональда первого порядка.

Из полученных выражений (5)–(7) следует, что упругие поля σ_{ij}^{Σ} убывают с расстоянием и при $r \gg r_d$ становятся очень малыми ($K_0(r/r_d \sim \sqrt{\pi r_d/2r} e^{-r/r_d}$ [11]). Поэтому величину r_d можно рассматривать как радиус экранирования упругого поля дисклинации в направлении скольжения дислокаций $0x$ (в направлении $0y$ упругое поле убывает гиперболически). Заметим, что рассматриваемый пространственный масштаб r_d совпадает с радиусом экранирования, введенным в [12].

Используя выражения (5)–(7), нетрудно найти энергию упругого поля W^{Σ} системы дисклинация + дислокации

$$W^{\Sigma} = \frac{D^2\omega^2}{2G} \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} \Big[\mathrm{sh}^2(y/r_d) K_1^2(r/r_d) + (1-2\nu)\mathrm{ch}^2(y/r_d) K_0^2(r/r_d) \Big] d\varphi$$

$$\simeq \frac{\sqrt{\pi}}{4} D\omega^2 r_d^2 \sqrt{\frac{R}{r_d}}. \qquad (8)$$

Сравнивая ее с энергией $W = D\omega R^2/8$ неэкранированной дисклинации [8], имеем

$$W^{\Sigma}/W = 2\sqrt{\pi}(r_d/R)^{3/2}. \qquad (9)$$

Сделаем некоторые оценки. Радиус экранирования r_d, согласно [12], имеет величину порядка среднего расстояния между дислокациями. При развитой пластической деформации плотность дислокаций $\rho \sim 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-2}$ [1]. Тогда $r_d \sim \rho^{-1/2} \simeq 10^{-5}\,\mathrm{cm}$. Если за характерный масштаб R взять размер зерна $D = 2\,\mu\mathrm{m}$, то $W^{\Sigma}/W \sim 3 \cdot 10^{-2}$; если $D = 10\,\mu\mathrm{m}$, то эффект составит уже $W^{\Sigma}/W \sim 3 \cdot 10^{-3}$.

Таким образом, имеет место существенный эффект снижения упругой энергии для дисклинации, экранированной системой избыточных дислокаций, распределенных по закону [4].

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 можно обобщить на случай зерна с размером $D \gg r_d$.

Список литературы

[1] *Рыбин В.В.* Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
[2] *Рыбин В.В.* // Вопросы материаловедения. 2002. № 4 (32). С. 11–33.
[3] *Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В.* // Вопросы материаловедения. 2002. № 4 (32). С. 113–122.
[4] *Вергазов А.Н., Лихачев В.А., Рыбин В.В.* // ФММ. 1976. Т. 42. С. 146–154.
[5] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
[6] *Косевич А.М.* Физическая механика реальных кристаллов. Киев.: Наук. думка, 1981. 328 с.
[7] *Де Вит Р.* Континуальная теория дисклинаций. М.: Мир, 1977. 208 с.
[8] *Владимиров В.И., Романов А.Е.* Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 224 с.
[9] *Pomanov A.E.* // Proc. Int. Conf. „Nanomaterials by Severe Plastic Deformation–NANOSPD2, December 9–13, 2002. Venna, Austria“. 2004, Wiley–VCH Verlag Gmbh & Co. KGaA. P. 215–225.
[10] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1976. 584 с.
[11] *Владимиров В.С.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1971. 512 с.
[12] *Сарафанов Г.Ф.* // ФТТ. 1997. Т. 39. В. 9. С. 1575–1579.