

УДК 530.182:539.214

©1993

## ГЕТЕРОГЕННАЯ ДИНАМИКА КИНКОВ

Б.В. Петузов

Произведена классификация режимов распада метастабильного состояния неупорядоченной линейной системы, основанная на возрастающей степени гетерогенности как зарождения, так и движения кинков. На модели хаотически распределенных статических точечных дефектов проиллюстрированы закономерности гетерогенной динамики кинков, в частности показана справедливость закона Аррениуса для температурной зависимости времени распада и найдена зависимость соответствующей эффективной энергии активации от нагрузки и других параметров задачи.

Наиболее существенной характеристикой кинетики распада метастабильного состояния линейной системы в чистом кристалле является вероятность гомогенного зарождения пар кинков в единицу времени на единице длины  $\mathcal{J}$  (см., например, [1]). Вследствие возможности статистически независимого рождения пар кинков на различных участках системы время распада  $t_p$  достаточно коротких систем, определяемое рождением одной пары, оказывается обратно пропорциональным длине системы  $L$ :  $t_p = (\mathcal{J}L)^{-1}$ . В достаточно протяженных системах, согласно Колмогорову [2], осуществляется режим множественного рождения и аннигиляции кинков, а время распада дается выражением  $t_p \sim (\mathcal{J}v)^{1/2}$  ( $v$  — скорость движения кинков).

В реальных достаточно „грязных“ или специально легированных материалах кинетика зарождения и движения кинков существенно модифицируется неоднородностями, создаваемыми примесями. Причины такого сильного влияния в принципе такие же, как и в других термоактивируемых процессах, например в распаде метастабильных состояний при фазовых переходах первого рода. Тесная аналогия между образованием кинков и зародышеобразованием при фазовых переходах отмечалась в работах [3,4]. А как хорошо известно, скорость зародышеобразования отличается повышенной чувствительностью к различного рода гетерогенностям [5].

С увеличением степени неупорядоченности гомогенная динамика кинков в режиме Колмогорова сменяется гетерогенными механизмами рождения и движения кинков. Характерным признаком нарушения гомогенных механизмов является изменение вида связи между длиной системы и временами рождения и пробега кинков. При гетерогенных механизмах определяющую роль играют наиболее сильные неоднородности потенциального рельефа на характерном масштабе длины системы. Естественно, что и закономерности распада при этом существенно трансформируются.

Целью настоящей работы является описание некоторых общих свойств малоизученной до настоящего времени гетерогенной динамики кинков. Возможность локального понижения барьера для зарождения кинков примесью, играющей роль своеобразного активатора, впервые в качественной форме была отмечена в работе [6]. В достаточно "грязном" или сильно легированном материале роль подобных активаторов играют уже не одиночные примеси, а флуктуации их плотности, и расчет динамики кинков должен производиться с учетом наличия статистического спектра таких флуктуаций. В условиях случайного беспорядка обычное для однородных систем описание, основанное на кинетическом уравнении, утрачивает многие свои преимущества. В настоящей работе предлагается иной подход к решению подобных задач, основанный на вероятностном рассмотрении и, исходя из наглядных масштабных соображений, формулируется общее масштабное или "скейлинговое" соотношение, позволяющее выделять из всего спектра флуктуаций наиболее существенные, определяющие динамику рассматриваемой системы. Это дает возможность произвести качественную классификацию режимов динамики кинков, обусловленных различной степенью влияния примесной подсистемы. Затем эта общая схема иллюстрируется конкретным расчетом в рамках упрощенной модели. Имеется в виду модель хаотических распределенных короткодействующих статических точечных дефектов [7]. Несмотря на очевидную ограниченность применимости этой модели к полному количественному описанию реальных материалов, она все же учитывает в первом приближении наиболее существенные для рассматриваемых явлений физические аспекты. Это позволяет выявить ряд интересных качественных особенностей, связанных с влиянием легирования, и дает основу для последующего уточнения и продвижения к более реальным моделям.

### Кинетика зарождения и торможения кинков на случайных неоднородностях

Распад метастабильного состояния линейной системы происходит, как известно, в два этапа, занимающих примерно одинаковое время: образование пары кинков и их последующее разбегание до аннигиляции. Различная роль примесей на этих этапах приводит, как неоднократно отмечалось, к существованию двух конкурирующих тенденций. При распространении кинков обусловленные примесями неоднородности создают дополнительные барьеры и тем самым тормозят распад. В то же время вариации потенциального рельефа приводят к локальным понижениям барьера и облегчают зарождение кинков, что создает тенденцию к ускорению распада.

С учетом того, что рождение пары кинков происходит на некоторой флуктуации плотности примесей, запишем закон Аррениуса для времени рождения  $t$  с измененной по сравнению со случаем чистого кристалла энергией активации

$$t = \tau_* \exp \left\{ \frac{E}{kT} \right\}, \quad (1)$$

$\tau_*$  — предэкспоненциальный множитель.

Величина изменения энергии активации по сравнению с чистым кристаллом характеризует "мощность" рассматриваемой флуктуации и отвечает взаимодействию парного кинка с каким-то числом примесей. Это

число примесей статистически флуктуирует при рождении кинков в различных местах вдоль системы, так что  $t$  характеризуется функцией распределения  $P_a(t)$  — вероятностью встретить флуктуацию, приводящую к времени рождения, меньшему  $t$ . Аналогично  $P_s(t)$  есть вероятность встретить флуктуацию, тормозящую движение кинков, с временем задержки, превышающим  $t$ .

Функции распределения  $P_a$  и  $P_s$  позволяют рассчитать усредненные значения частоты образования кинков  $\bar{J}$  и скорости их движения  $\bar{v}$  и обобщить в определенном интервале параметров (см. ниже) колмогоровский режим распада с временем перехода  $t_p \sim (\bar{J}\bar{v})^{1/2}$ . Кроме того, знание функций распределения дает возможность проанализировать границы реализации этого режима в неупорядоченных материалах.

### Условие согласования пространственных масштабов

Воспроизведем кратко физически наиболее наглядный способ вывода закономерностей колмогоровского режима распада [3,4], допускающий обобщение на интересующие нас системы. Этот способ основан на совпадении характерных масштабов, определяющих «пространство зарождения кинков»  $L_a$  и их длину пробега  $L_s$ . При однородных условиях  $L_a = (\mathcal{J}t)^{-1}$ ,  $L_s = vt$ . Равенство  $L_a(t) \simeq L_s(t)$  и определяет самосогласованным образом время перехода в чистом кристалле  $t_p^0 \sim (\mathcal{J}v)^{1/2}$ . Совпадающие при  $t = t_p^0$  длины  $L_a = L_s = L_0^0$  задают масштаб  $L_0^0 \sim (v/\mathcal{J})^{1/2}$ , играющий фундаментальную роль, поскольку он определяет среднюю длину пробега кинков до аннигиляции, средний размер участков без кинков, а обратная величина  $(L_0^0)^{-1}$  является динамической плотностью кинков в системе.

Колмогоровский режим распада обобщается на случай кристаллов с примесями путем замены  $v$  и  $\mathcal{J}$  соответствующими перенормированными усредненными значениями  $\bar{v}$  и  $\bar{\mathcal{J}}$  и справедлив в области параметров  $I$  на рисунке, отвечающей сохранению «статистической однородности», возникающей после усреднения по достаточно большим масштабам длин. Такая однородность нарушается при определенных значениях параметров задачи, что приводит к изменению вида связи масштабов  $L_a$  и  $L_s$  с временем. Однако условие согласования масштабов

$$L_a(t_p) \simeq L_s(t_p) \quad (2)$$

сохраняет свой смысл и является общим соотношением, позволяющим самосогласованным образом рассчитывать кинетику различных режимов распада метастабильных состояний в неупорядоченных системах. Определяемый (2) характерный масштаб  $L_0$  по-прежнему является основной характеристикой динамической формы дислокации при всех режимах распада.

### Классификация режимов динамики кинков

Нарушение однородного механизма движения кинков в неупорядоченной системе, получившее название явления квазилокализации, было обнаружено и изучалось на различных моделях в [8-11]. В основе

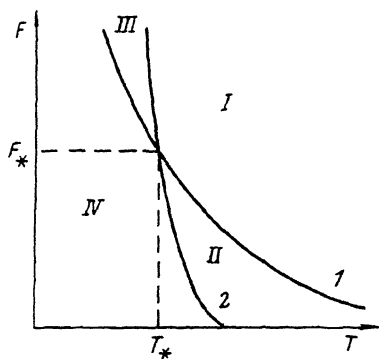


Диаграмма режимов распада метастабильного состояния неупорядоченной линейной системы.

1 — линия квазилокализационного перехода, 2 — граница перехода к гетерогенному зарождению кинков. Область I отвечает возмущенному примесями режиму Колмогорова; II — область гетерогенного движения и однородного в среднем рождения кинков; III — область движения кинков с конечной средней скоростью при гетерогенном их зарождении; IV — область гетерогенного рождения и движения кинков.

явления лежит чрезвычайно простое и общее свойство распределения времен задержек  $P_s(t)$ , которое можно пояснить следующим образом. Так как средняя скорость движения кинков  $v$  обратно пропорциональна интегралу, определяющему среднее время задержки на препятствиях  $\bar{\tau} \sim \int t(dP_s/dt)dt$ ,  $\bar{v}$  конечна лишь при достаточно быстром убывании  $P_s(t)$  на больших временах. С увеличением беспорядка функция распределения времен задержки убывает все медленнее и в конце концов  $\bar{\tau}$  обращается в бесконечность, а  $\bar{v}$  — в нуль. Обращение в нуль средней скорости движения приводит к смене гомогенного в среднем режима движения кинков на гетерогенный. В гетерогенном режиме основное время задержки при пробеге расстояния  $L_s$  определяется наиболее сильным барьером на этой длине. Типичная оценка мощности такого наиболее сильного барьера следует из соотношения  $L_s \sim (P_s(t))^{-1}$ . Равенство (2) с найденным  $L_s$  и  $L_a = (\bar{J}t)^{-1}$  дает возможность рассчитать закономерности соответствующего режима распада, действующего в области II на рисунке.

Линия 2 на рисунке изображает границу перехода к гетерогенному режиму зарождения кинков. Эта граница находится несколько иначе по разные стороны от линии 1, изображающей границу области квазилокализации (диаграмма на рисунке отвечает предположению, что линии 1 и 2 пересекаются). Как уже упоминалось, „статистическая гомогенность“ зарождения кинков в неупорядоченной системе имеет место лишь после усреднения по достаточно большим масштабам длин. Уточним, какой именно масштаб длины имеется в виду. Главный вклад при вычислении средней частоты рождения кинков  $\bar{J}$  дают некоторые „оптимальные флуктуации“, характеризуемые энергией активации  $\bar{E}$ . Типичное расстояние между такими флуктуациями есть  $\bar{L} \sim (P_a(t(\bar{E})))^{-1}$ . Эта длина и определяет масштаб гетерогенности зарождения кинков. На больших масштабах  $L \gg \bar{L}$  флуктуации с мощностью, соизмеримой мощности „оптимальной флуктуации“, встречаются достаточно часто и частота рождения кинков „усредняется“, в результате чего полная скорость рождения кинков пропорциональна  $L^{-1}$ . На масштабах  $L \ll \bar{L}$  зарождение кинков происходит гетерогенно, наибольший вклад в скорость рождения вносят наиболее сильные флуктуации, встречающиеся на данной длине. При этом зависимость этой скорости от длины изменяется [7].

В области высоких температур и нагрузок роль вариаций потенциального рельефа сравнительно невелика и частота рождения кинков определяется относительно слабыми и часто встречающимися флуктуациями,

расстояние между которыми  $\bar{L}$  меньше характерного размера  $L_0$ . Это область „статистически гомогенного“ рождения кинков, расположенная выше линии 2 на рисунке. Однако при понижении температуры или нагрузки определяющими становятся все более сильные (и, следовательно, редкие) флуктуации. В конце концов расстояние между такими флуктуациями  $\bar{L}$  начинает превышать характерный масштаб длины  $L_0$ , при этом закономерности распада определяются гетерогенным зарождением кинков. Уравнение (2) для самосогласованного определения времени распада принимает вид

$$L_a(t_p) \sim \frac{1}{P_a(t_p)} \simeq L_s(t_p).$$

В области параметров, отвечающей конечной средней скорости кинков (область III на рисунке),  $L_s = \bar{v}t$ . Соответствующий режим описан в работе [12].

В области квазилокализации  $L_s \sim (P_s(t))^{-1}$  и условие согласования масштабов дает следующее уравнение для времени распада:

$$P_a(t_p) \simeq P_s(t_p). \quad (3)$$

Соответствующий режим, отвечающий наиболее радикальной перестройке закономерностей, характерных для чистых кристаллов, осуществляется в области IV на рисунке.

Решение уравнения (3) в принципе позволяет количественно описывать скорость распада в этом режиме для различных конкретных моделей неупорядоченности.

Один пример такого описания, обобщающий некоторые предварительные результаты, полученные в [7], будет дан в следующем разделе. Однако прежде сделаем замечание общего характера. Решению уравнения (3) отвечают флуктуации в распределении примесей, являющиеся довольно редкими (маловероятными), но играющими ключевую роль в определении закономерностей кинетики распада. При их описании приходится использовать далекие асимптотики функций распределения, которые часто выходят за рамки применимости упрощенных моделей, ориентированных, как правило, на типичные конфигурации распределения примесей. Эту повышенную чувствительность к выбору модели полезно иметь в виду при конкретных приложениях теории.

### Скорость распада при хаотическом распределении примесей

Для расчета влияния на скорость распада хаотически распределенных короткодействующих примесей воспользуемся функциями распределения  $P_a$  и  $P_s$ , найденными в работах [7,9]. В этих работах в качестве параметра, характеризующего „мощность“ флуктуации, выбиралась величина  $x$ , связанная с энергией активации  $E$  соотношением

$$E = 2E_k \left[ 1 - (1+x) \sqrt{\frac{F}{F_0}} \right].$$

Здесь  $E_k$  — энергия кинка;  $F$  — внешняя сила, действующая на кинк;  $F_0$  — параметр, определяемый силой взаимодействия кинков между собой (при упругом потенциале взаимодействия кинков, разделенных расстоянием  $l$ ,  $E_{вз} = -\frac{\alpha}{l} F_0 \equiv E_k^2/\alpha$ ). При  $x = 0$   $E$  переходит в энергию

образования пары кинков в чистом материале. Нас же в настоящей работе будет интересовать случай  $x \gg 1$ , отвечающий сильно легированным (или "грязным") кристаллам, для которых взаимодействие с примесями дает больший вклад в величину энергии активации, чем взаимодействие кинков между собой. Для этого случая полученная в [7] вероятность встретить флуктуацию, отвечающую данному времени рождения пары кинков, сводится к выражению

$$P_a(t(\varepsilon)) \simeq \exp \left\{ -\frac{2E_k}{U} \sqrt{\frac{2F_c}{F_0}} \Psi(1-\varepsilon)^2 \frac{F_0}{2F_c} \right\},$$

$$\Psi(y) = \sqrt{y} \ln \left( \sqrt{1+y^2} + y \right) - \int_0^y dz \left( \frac{z}{1+z^2} \right)^{1/2} = \begin{cases} \frac{1}{3} y^{3/2}; & y \ll 1, \\ \sqrt{y} \ln \frac{2y}{e^2}; & y \gg 1. \end{cases} \quad (4)$$

Здесь  $U$  — энергия порядка энергии связи примеси с системой,  $\varepsilon = E/2E_k$ ,  $F_c = \rho U$ ,  $\rho$  — средняя линейная плотность примесей.

Для вероятности, определяющей время пробега кинков, имеет место выражение [9]

$$P_s(t(\varepsilon)) \simeq t^{-\frac{kT}{U} \varphi(F)} \simeq \exp \left\{ -\frac{2E_k}{U} \varepsilon \varphi(F) \right\}, \quad (5)$$

где  $\varphi(F)$  находится из уравнения

$$\frac{2}{4} (\text{Ch} - 1) = \frac{F}{F_c}. \quad (6)$$

Из равенства (3) с учетом (4) и (5) выражаем  $\varphi$  в виде

$$\varphi \sqrt{\frac{2F_c}{F_0}} \frac{1}{3} \Psi \left( (1-\varepsilon)^2 \frac{F_0}{2F_c} \right)$$

и, подставляя в (6), получаем уравнение для  $\varepsilon$ . Характерным свойством функций распределения  $P_a$  и  $P_s$ , выраженных через  $\varepsilon$ , является их независимость от температуры. В результате и получающаяся из решения уравнения эффективная энергия активации не зависит от температуры. Таким образом, в рассматриваемом режиме (в отличие от режимов в областях II и III на диаграмме) для температурной зависимости времени распада оказывается справедливым закон Аррениуса.

В области высоких нагрузок  $F \gg F_c (F_c/F_0)^{1/2}$  для  $\Psi(y)$  следует использовать асимптотику, отвечающую большим значениям аргумента

$$\Psi(y) \simeq \sqrt{y} \ln \frac{2y}{e^2}.$$

В этом случае уравнение для  $\varepsilon$  принимает вид

$$\frac{2\varepsilon}{(1-\varepsilon) \ln \left[ (1-\varepsilon)^2 \frac{F_0}{2F_c} \right]} \left\{ \text{Ch} \left[ \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \ln \left[ (1-\varepsilon)^2 \frac{F_0}{2F_c} \right] \right] - 1 \right\} = \frac{F}{F_c}. \quad (7)$$

Это соотношение дает в обращенном виде зависимость энергии активации от нагрузки.

В области малых нагрузок  $F \ll F_c (F_c/F_0)^{1/2}$  для  $\Psi(y)$  можно использовать приближенное выражение, отвечающее малым значениям аргумента  $\Psi(y) \simeq 1/3 \cdot y^{3/2}$ , что приводит к зависимости энергии активации от нагрузки в виде

$$E = 2E_k \left[ 1 - \left( \frac{6F}{F_0} \right)^{1/3} \right]. \quad (8)$$

Как видно из (8), эффективная энергия активации распада при наличии примесей в области низких нагрузок  $F \rightarrow 0$  близка к энергии двух кинков, в то время как в чистых кристаллах в соответствии с формулой Колмогорова  $t_p \sim (\mathcal{J}v)^{-1/2}$  энергия активации примерно в два раза меньше. Результат (8) не зависит от количества примесей в кристалле и имеет место, хотя и в сужающейся области нагрузок, при сколь угодно малой их концентрации.

В области более высоких нагрузок  $F \gg F_c$  вследствие экспоненциального характера изменения левой части (7), получающаяся зависимость энергии активации от нагрузки близка к логарифмической, как это было продемонстрировано в [7].

Для более наглядного представления о размере области гетерогенной динамики кинков на рисунке укажем получающуюся в данной модели оценку координат точки пересечения границ различных режимов. Из сформулированных выше в общем виде условий, определяющих границы, следует, что линия 1 описывается уравнением  $\varphi = U/kT$ , линия 2 отвечает в рассматриваемом пределе

$$\varphi \simeq \sqrt{\frac{F_c}{F_0}} \frac{U}{kT} \cdot \exp \left\{ \frac{U}{2kT} \right\},$$

где  $\varphi$  выражается через  $F$  при помощи (6). Точка пересечения имеет координаты

$$T_* \sim \frac{U}{k \ln \frac{F_0}{F_c}}, \quad F_* \sim \frac{F_0}{\ln \frac{F_0}{F_c}}.$$

Эта оценка показывает характер зависимости размеров области гетерогенной динамики от плотности примесей  $\rho$  ( $F_c = \rho U$ ) и других параметров задачи.

Изучение кинетики распада метастабильных состояний неупорядоченной линейной системы в различных моделях приводит к довольно общей картине, подытоженной в настоящей работе. Наиболее существенной ее чертой является возрастание по мере понижения температуры или нагрузки роли флуктуаций потенциального рельефа, увеличивающее степень гетерогенности процесса распада. Это увеличение степени гетерогенности проходит через ряд качественных изменений режимов рождения и движения кинков. Для новых режимов динамики кинков (называемых в тексте гетерогенными) характерным свойством является определяющая роль не типичных в своей массе конфигураций случайного рельефа, а некоторых специфических редких флуктуаций. В настоящей работе для

выделения этих ключевых флуктуаций из всего спектра предложено использовать общее условие самосогласования пространственных масштабов задачи, характеризующих пространство зарождения кинков и длину их пробега до аннигиляции.

Закономерности такого распада радикально отличаются от собственных чистым материалам и обусловленных динамикой кинков в гомогенных условиях. Для иллюстрации этого отличия приведен явный вид закономерностей гетерогенной динамики кинков, полученных для модели хаотически распределенных статических точечных дефектов. Показано, что температурная зависимость времени распада в гетерогенном режиме подчиняется закону Аррениуса, и изучена зависимость соответствующей энергии активации от нагрузки. Оценены размеры области параметров, при которых реализуется гетерогенная динамика.

Концентрационная зависимость эффективной энергии активации определяется конкуренцией обусловленных флуктуациями плотности примесей эффектов ускорения зарождения кинков и торможения их разбегания, но в целом в области малых нагрузок энергия активации увеличивается по сравнению с чистым кристаллом. Таким образом, наличие примесей приводит к уменьшению скорости распада метастабильного состояния. Это обстоятельство качественно согласуется с уменьшением в области низких напряжений скорости пластического течения материалов (их упрочении) при легировании (см., например, [13]), так как свидетельствует об уменьшении подвижности дислокаций под воздействием примесей.

#### Список литературы

- [1] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
- [2] Колмогоров А.Н. // Изв. АН СССР. Сер. мат. 1937. № 3. С. 355–358.
- [3] Lothe J., Hirth J.P. // Phys. Rev. 1959. V. 115. N 3. P. 543–550.
- [4] Казанцев А.П., Покровский В.Л. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. № 2. С. 677–682.
- [5] Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука, 1975. 592 с.
- [6] Weertman J. // J. Appl. Phys. 1958. V. 29. N 12. P. 1685–1689.
- [7] Петухов Б.В. // ФТТ. 1990. Т. 32 № 2. С. 251–259.
- [8] Петухов Б.В. // ФТТ. 1971. Т. 13. № 5. С. 1445–1449.
- [9] Петухов Б.В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 10. С. 2893–2897.
- [10] Vinokur V.M. // J. Physique. 1986. V. 47. N 9. P. 1425–1429.
- [11] Feigel'man M.V., Vinokur V.M. // J. Physique. 1988. V. 49. N 10. P. 1731–1736.
- [12] Петухов Б.В. // ФММ. 1989. Т. 68. № 3. С. 466–473.
- [13] Судзуки Т., Ёсинага Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. М.: Мир, 1989. 296 с.

Институт теоретической физики РАН  
Черноголовка  
Московской обл.

Поступило в Редакцию  
11 октября 1990 г.  
В окончательной редакции  
4 февраля 1992 г.