

01:05:12

©1993 г.

## СРАВНЕНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ, ОПРЕДЕЛЯЕМЫХ В КОМПЬЮТЕРНЫХ И ПРЯМЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАХ

*С. П. Вагин, Д. Ш. Ибрагимова, Ю. С. Пятилетов, О. Г. Тюпкина, П. В. Чакров*

Рассмотрено движение дислокационных ансамблей с учетом дальнедействующих взаимодействий и оценкой вклада этого взаимодействия в различные параметры, характеризующие движение дислокаций через точечные барьеры. Проведены сопоставления результатов ЭВМ эксперимента в приближениях одиночной дислокации и дислокационного ансамбля. Приводятся результаты электронно-микроскопического исследования образцов алюминия, облученных протонами с энергией 1 МэВ при температуре менее 100°С до дозы  $7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ . Сравнение этих результатов с данными компьютерного эксперимента показало хорошее совпадение вероятностно-геометрических характеристик движения дислокаций. В частности, получено согласие между соответствующими распределениями по  $\varphi$ ; (характеризует силу взаимодействия дислокация-препятствие). Это дает возможность оценивать такие параметры, как мощности дефектов разного вида, их относительные концентрации и напряжения, действующие на дислокационные сегменты, используя имитационный компьютерный эксперимент.

### Введение

К настоящему времени, используя (I) предположения барьерной модели и (II) рассматривая дислокацию в виде гибкой линии постоянного натяжения, различные авторы (начиная с Формена и Мейкина) решили самые разные задачи. В частности, с помощью ЭВМ экспериментов по моделированию движения дислокации через точечные барьеры проводились исследования, позволяющие имитировать деформацию в условиях нагружения с постоянной скоростью [<sup>1-3</sup>], ползучести [<sup>4-6</sup>], деформирования с постоянной скоростью [<sup>7</sup>] и т.д. Эксперименты такого рода позволяют решать как фундаментальные задачи, выявляя механизмы деформационных процессов, так и задачи прикладного характера по изучению закономерностей протекания деформации. Особенно успешно они использовались для исследований радиационного, твердорастворного и других типов упрочнения металлов [<sup>8</sup>].

Однако сопоставление результатов ЭВМ расчетов, проводимых в предположениях I, II, с данными реальных экспериментов возможно лишь

при определенных условиях. А именно в тех случаях, когда деформация контролируется скольжением одиночных дислокаций и дальнедействующими взаимодействиями между дислокациями можно пренебречь.

По данным электронно-микроскопических исследований [9] в ряде металлов с определенной дефектной структурой такой механизм упрочнения имеет место при напряжениях, не превышающих критическое напряжение сдвига, и описывает малую часть реальных ситуаций.

В общем же случае дальнедействующие взаимодействия между дислокациями, в том числе и скользящими, играют заметную, а зачастую и решающую роль в процессе движения дислокаций и эволюции дефектных структур.

В работах [10,11] предложена модель компьютерного эксперимента, позволяющая исследовать самосогласованное движение взаимодействующих дислокаций в рамках предположений I, II. Основное отличие предложенной модели от классического варианта [1,3,4,8] заключается в том, что напряжение, действующее на сегменты, является результатом внешнего воздействия и дальнедействующих взаимодействий между скользящими дислокациями.

Как отмечалось выше, с помощью моделирования скольжения одиночных дислокаций получен довольно большой объем информации. В связи с этим определенный интерес могут вызвать оценки вклада, приносимого дальнедействующими взаимодействиями между скользящими дислокациями в различные параметры, характеризующие движение дислокаций в своих плоскостях скольжения. Это и явилось основной целью данной работы. Кроме того, проведено сравнение полученных результатов с данными электронно-микроскопических исследований.

## Описание компьютерной модели формирования и движения дислокационных ансамблей

Предполагалось, что дефекты — это жестко закрепленные точечные барьеры, взаимодействующие со скользящими дислокациями в приближении сосредоточенной силы, а дислокации представляют собой гибкие линии постоянного натяжения. В рамках принятых приближений моделирование согласованного движения взаимодействующих дислокаций возможно, если известно как движется отдельная дислокация при наличии в этой же плоскости скольжения других и каким образом происходит передача движения между дислокациями.

Движение отдельной дислокации рассматривалось по классической схеме [1,8] посредством последовательного перехода ее из одной конфигурации в другую. Напряжения  $\tau_N^k$ , действующие на сегменты  $N$  дислокации  $k$ , заставляют последнюю прогибаться между точечными барьерами и преодолевать их, если соответствующие углы прогибания  $\varphi^k$  меньше некоторого порогового значения  $\varphi_{cr}^N$ , характеризующего мощность препятствий. Дислокация движется до тех пор, пока не достигнет устойчивой конфигурации (все  $\varphi^N > \varphi_{cr}^N$ ) или не выйдет на верхнюю границу площадки моделирования. Наличие других дислокаций влияет на движение рассматриваемой через  $\tau_N^k$ .

Напряжения  $\tau_N^k$ , действующие в центре сегментов  $N$ , вычислялись с учетом дальнедействующих взаимодействий между дислокациями по

формуле

$$\tau_N^k = \sum_n (\tau_{xy}^{(n)} \cos(\theta_2^{(n)})) + \tau_{ex} \cos \theta_1. \quad (1)$$

Суммирование проводится по всем сегментам дислокаций  $n$ , находящихся на площадке моделирования, за исключением рассматриваемого  $N$ ;  $\theta_1$  — угол между хордой сегмента  $N$  и осью, перпендикулярной  $\tau_{ex}$ ;  $\theta_2$  — угол между хордами  $n$  и  $N$ ;  $\tau_{ex}$  — внешнее напряжение.

Сдвиговые компоненты  $\tau_{xy}^{(n)}$ , обусловленные дальнедействующими взаимодействиями между сегментами  $n$  и  $N$ , рассчитывались в точке центра сегмента  $N$  согласно [11] (обозначим эту точку как  $(z_c, x_c)$ ). Для этого дислокационные конфигурации аппроксимировались последовательностью прямолинейных отрезков примерно равной длины вдоль линии дислокации. Подчеркнем, что такая аппроксимация дислокационной линии использовалась только для вычислений  $\tau_N^k$ . При анализе процесса прохождения дислокациями точечных барьеров дислокационные линии представляли собой последовательности сегментов, выгибающихся с радиусом  $R_N^k = 1/(2\tau_N^k)$ , если  $\tau_N^k$  и  $R_N^k$  выражены в относительных единицах  $\tau_0 = \mu b/l_0$  и среднего расстояния между препятствиями  $l_0$  соответственно ( $\mu$  — модуль сдвига,  $b$  — величина вектора Бюргерса).

Для краевых дислокаций с вектором Бюргерса  $b$ , направленным по  $\tau_{ex}$ , сдвиговая компонента  $\tau_{xy}^{(n)}$  будет иметь вид [12]

$$\tau_{xy}^{(n)} = \cos \theta \frac{1}{4\pi(1-\nu)x_c} \left( \frac{\lambda_x}{r_2} - \frac{\lambda_1}{r_1} \right). \quad (2)$$

Здесь  $\theta$  — угол между отрезком  $n$  и осью, перпендикулярной  $\tau_{ex}$ ;  $\nu$  — коэффициент Пуассона;  $x_c$  — кратчайшее расстояние между точкой  $(z_c, x_c)$  сегмента  $N$  и отрезком  $n$ ;  $r_1, r_2$  и  $\lambda_1, \lambda_2$  — расстояния между концами отрезка  $n$  и точкой  $(z_c, x_c)$  и проекция этих расстояний на отрезок  $n$  соответственно.

В ЭВМ экспериментах на площадке моделирования размером  $100l_0 \times 50l_0$  беспорядочным образом располагались 5000 точечных барьеров заданной мощности  $\varphi_{cr}$ . Считалось, что верхняя граница непроницаема для дислокаций, а на нижней работает источник. Он испускает краевые дислокации, если напряжение на старте больше нуля. На дислокации действует постоянное внешнее напряжение  $\tau_{ex}$ , температура равна нулю.

Не вдаваясь в подробности, сформулируем основные принципы, позволяющие реализовать согласованное движение нескольких дислокаций в ЭВМ эксперименте.

Движение отдельной дислокации рассматривается при фиксированных положениях всех остальных. Так как локальные напряжения  $\tau_N^k$  могут принимать как положительные, так и отрицательные значения, то перемещения соответствующих участков дислокации происходят как по, так и против  $\tau_{ex}$ . После каждого элементарного акта перемещения для сегментов, участвующих в нем, пересчитываются  $\tau_N^k$ .

После подвижки одной (любой) из дислокаций ансамбля анализируется возможность движения головной дислокации. Переход к анализу движения дислокации, лежащей ниже рассматриваемой, происходит, если

верхняя неподвижна. Эксперимент считается законченным, если соответствующие «стартовые» напряжения меньше (или равны) нулю. При проведении ЭВМ-экспериментов используются «зеркальные» граничные условия.

## Сравнение параметров, характеризующих скольжение дислокаций в приближениях одиночных дислокаций и дислокационных ансамблей

В результате проведения подобных экспериментов на площадке моделирования образуются скопления краевых дислокаций. В области анализа преодоления барьеров отдельными дислокациями модель, позволяющая исследовать движение дислокационных ансамблей, имеет много общего с моделью Формена и Мейкина. Ясно, что это происходит из-за общности предположений, касающихся свойств дефектов и дислокаций.

Некоторое отличие заключается в частичном учете самодействия дислокаций. При расчетах напряжений, действующих на дислокационные сегменты, учитываются дальнедействующие поля напряжений от других сегментов своей дислокации. Рассмотрим движение одиночной дислокации с учетом этого фактора по соотношениям (1), (2). На рис. 1, *a, б* путь движения дислокации представлен в виде последовательности конфигураций, полученных в приближениях невзаимодействующих сегментов (*a*) и с учетом их дальнедействующих взаимодействий (*б*). Здесь же приведены гистограммы по напряжениям  $\tau_N^1$ .

Следует отметить, что при одинаковых по всей длине дислокации напряжениях (рис. 1, *a*) в процессе преодоления препятствий основную роль играют длины соседних сегментов и их наклон относительно друг друга. Те же факторы действуют и в случае *б*, но на «выпуклостях» дислокационной конфигурации напряжения обычно меньше, а на «вогнутых» участках больше  $\tau_{ex}$ , что затрудняет развитие первых и подтягивает вторые. Очевидно, этот фактор и является причиной более равномерного движения дислокации, наблюдаемого в случае *б*.

Анализируя распределение по  $\tau_N^1$ , можно заметить, что абсолютное большинство сегментов (порядка 80%) испытывает напряжения, близкие к  $\tau_{ex}$ . Все это приводит к выводу, что учет дальнедействующих взаимодействий в случае движения одиночной дислокации должен дать некоторые поправки к параметрам, характеризующим такой процесс. Тем не менее трудно ожидать, чтобы эти поправки были кардинальными. Следует отметить также, что с увеличением площади «заметания» для распределений по  $\tau_N^1$  присутствует эффект выхода на стационар.

Однако действие дислокационного сегмента самого на себя, позволяющее рассчитывать его форму, не учитывается. Согласно [13], это можно делать, хотя погрешность вычислений  $\tau_{cr}$  составляет величину  $\sim 10\%$  для таких «сильных» барьеров, как поры [14].

Проследим процесс формирования ансамблей скользящих дислокаций на препятствиях одной мощности при напряжениях, не превышающих критическое напряжение сдвига  $\tau_{cr}$ . Напомним, что в данной работе под  $\tau_{cr}$  понимается  $\tau_{ex}$ , при котором головная дислокация скопления проходит всю площадку моделирования. Критическое напряжение сдвига одиночной дислокации обозначим  $\tau_{cr}^0$ .

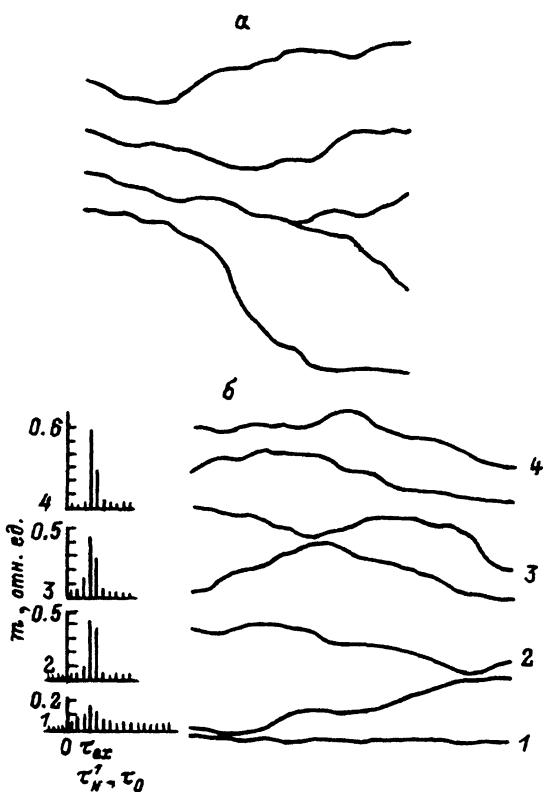


Рис. 1. Последовательности дислокационных конфигураций, наблюдающиеся при прохождении одиночной дислокацией препятствий одной мощности.

$\varphi_{cr} = 2.6$  рад,  $\tau_{ex} = 0.2\tau_0$ ; а — в приближении невзаимодействующих сегментов; б — с учетом дальнедействующих взаимодействий между отдельными сегментами дислокации;  $m_i$  — доля сегментов (от их общего числа на конфигурации), попадающих в соответствующий интервал  $\tau_N^1$ . Нумерация гистограмм соответствует нумерации конфигураций.

Оказалось, что при выбранных напряжениях больших дислокационных ансамблей на площадке моделирования не образуется. Причем наблюдается некоторая закономерность между числом дислокаций в скоплениях и мощностью барьеров. Для «слабых» препятствий ( $\varphi_{cr} \gtrsim 2.4$  рад) с ростом  $\tau_{ex}$  наблюдалось появление второй дислокации на старте. Однако такая ситуация возникла при  $\tau_{ex} > 0.5\tau_{cr}^0$ . Это приводило к увеличению напряжения, действующего на головную дислокацию до величины  $> \tau_{cr}^0$ , и ее движению до границы площадки моделирования.

Для препятствий, подпадающих под разряд «средних» ( $1.8 \lesssim \varphi_{cr} \lesssim 2.4$  рад) и «сильных» ( $\varphi_{cr} < 1.8$  рад), аналогичная ситуация возникала при появлении третьей и четвертой дислокаций на старте соответственно. Но-видимому, это является основной причиной незначительного изменения критического напряжения сдвига за счет формирования дислокационных скоплений. На рис. 2 приведены соответствующие зависимости.

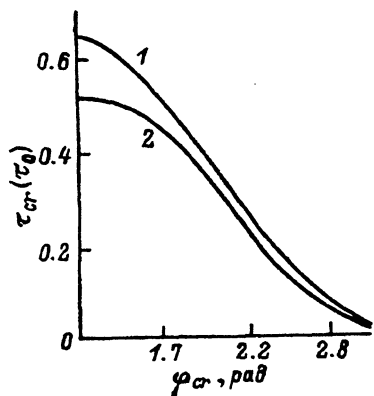


Рис. 2. Зависимость  $\tau_{cr}$  от  $\varphi_{cr}$ .  
1 — для одиночной дислокации,  
2 — для дислокационных ансамблей.

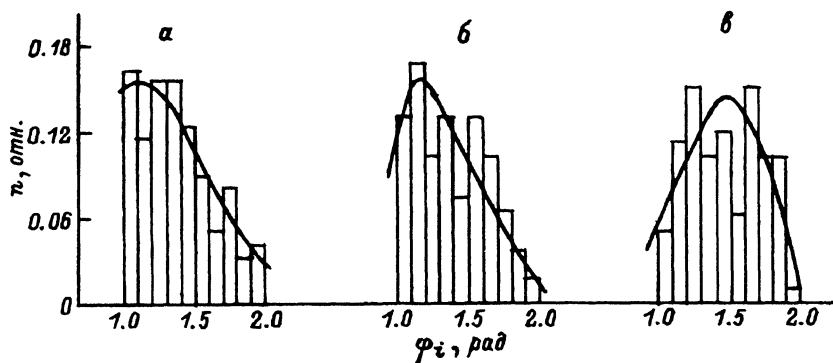


Рис. 3. Распределения по  $\varphi_i$ , полученные в приближении одиночной дислокации.  $\varphi_{cr} = 1.6$  рад,  $\tau_{cr} = 0.5\tau_0$ ;  $n$  — доля сегментов, подпадающих под соответствующий интервал  $\varphi_i$ ; а —  $\tau_{\epsilon x} = 0.9\tau_{cr}$ ; б —  $\tau_{\epsilon x} = 0.58\tau_{cr}$ ; в —  $\tau_{\epsilon x} = 0.16\tau_{cr}$ .

Теперь проанализируем такие вероятностно-геометрические характеристики движения дислокаций, как распределения по углам прогибания дислокации на соседних с  $i$ -м препятствиях  $\varphi_i$  (характеризует силу взаимодействия дислокация-препятствие  $i$ ).

Для препятствий одной мощности в приближении одиночной дислокации наблюдается тенденция сдвига максимума распределения по  $\varphi_i$  в сторону больших углов (меньших сил) при уменьшении  $\tau_{\epsilon x}$ . При этом распределение становится более симметричным и узким. На рис. 3 приведены соответствующие данные, иллюстрирующие сказанное. К настоящему времени в литературе накоплено довольно много информации по данному вопросу. В том числе известны попытки аналитического описания распределений подобного рода [15]. Заметим, что полученные результаты согласуются с литературными данными.

В том случае, когда моделируется скольжение дислокационных ансамблей, отмеченные тенденции изменения распределений по  $\varphi_i$  с уменьшением  $\tau_{\epsilon x}$  сохраняются. При этом наблюдаются некоторые отличия в

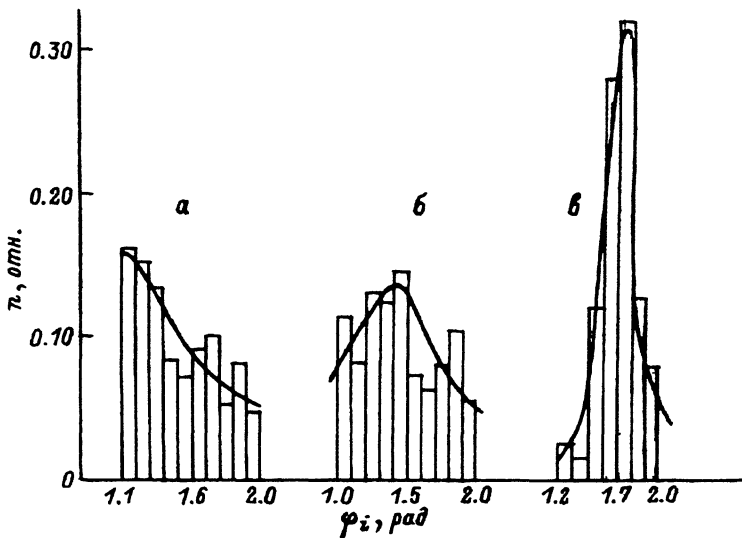


Рис. 4. Распределения по  $\varphi_i$  для 1-, 2-, 3-й дислокаций ансамбля (а, б и в соответственно).

$\varphi_{cr} = 1.6$  рад,  $\tau_{ex} = 0.9\tau_{cr}$ ; нумерация начинается от головной дислокации ансамбля.

форме распределений. На рис. 4 приведены распределения по  $\varphi_i$  для дислокаций ансамбля, возникающего при тех же  $\varphi_{cr}$  и  $\tau_{ex}$ , что и для случая, показанного на рис. 3,а. Видно, что распределения имеют более пологую форму. С удалением от головы скопления максимум распределения смещается в сторону меньших сил (больших углов).

Проанализируем ситуацию для двух типов препятствий. На рис. 5,а-в приведены распределения по  $\varphi_i$ , полученные при моделировании скольжения одиночных дислокаций (е) и дислокационных ансамблей. Видно, что данные распределения описываются двумя гармониками. Из вида распределений можно предложить следующие заключения. Распределения, полученные в приближениях одиночных дислокаций и дислокационных ансамблей, качественно подобны. Разделение распределений на две составляющие (по числу типов препятствий) прослеживается для всех дислокаций ансамбля и более всего заметно для головной дислокации ансамбля. Наиболее отчетливо данный эффект проявляется при напряжении, близком к  $\tau_{cr}$ . С уменьшением  $\tau_{ex}$  гармоники распределения приобретают более пологую форму, увеличивается их перекрывание. Начиная с некоторого напряжения  $\tau^*$  гармоники становятся неразличимыми. При параметрах, заданных для рис. 5,  $\tau^* \cong 0.4\tau_{cr}$ .

Таким образом, при  $\tau \leq \tau_{cr}$  на площадках моделирования с хаотическим пространственным расположением препятствий больших дислокационных скоплений не возникает. Дислокационные ансамбли, включающие десятки и более дислокаций, могут возникать на границах (если выполняются условия их непроницаемости) при  $\tau > \tau_{cr}$  [10,11]. Следует подчеркнуть, что данный вывод получен в предположениях барьерной модели для дефектов, пространственное расположение которых характеризуется как равномерное. Специфичные пространственные располо-

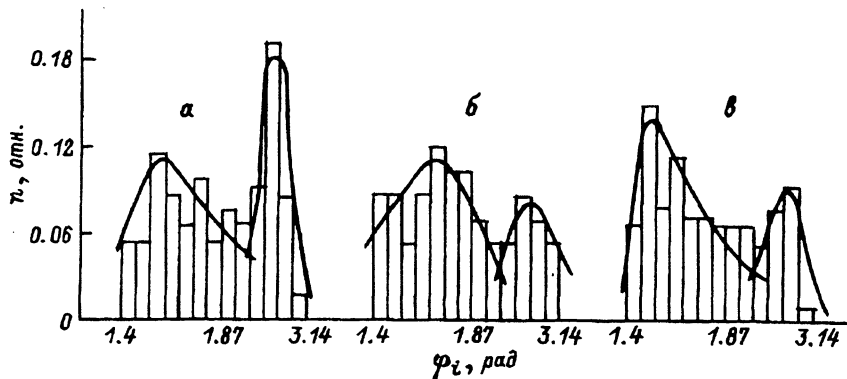


Рис. 5. Распределения по  $\varphi_i$ , полученные в приближениях одиночной дислокации (в), дислокационных ансамблей (а,б) для 1- и 3-й дислокации соответственно.

$\varphi_{cr}^1 = 2.8$  рад,  $\varphi_{cr}^2 = 1.4$  рад,  $\kappa_{\varphi_1} = 0.6$  (относительная концентрация препятствий, имеющих  $\varphi_{cr}^1$ );  $\tau_{ex} = 0.9\tau_{cr}$ .

жения в виде скоплений «сильных» дефектов могут привести к другим результатам.

В рамках предположений, принятых в данной работе, учет возможности формирования ансамблей дислокаций одного знака и дальнедействующих взаимодействий между ними не вносит существенных изменений в качественное поведение основных параметров, описывающих скольжение дислокаций. Влияние указанных эффектов проявляется в том, что движение дислокаций становится более равномерным (рис. 1). Уменьшается напряжение прохождения дислокациями площадки моделирования рис. 2. Поправка к величине  $\tau_{cr}$  увеличивается с ростом  $\varphi_{cr}$  и достигает 20% для «сильных» препятствий. Функции распределений по  $\varphi_i$  имеют более плавный вид. На них хорошо выявляется влияние препятствий различной мощности (рис. 3-5).

Все это, во-первых, лишний раз доказывает правомерность тех многочисленных работ, в которых на основании результатов по моделированию скольжения одиночных дислокаций предпринимались попытки найти объяснение экспериментальным закономерностям. Во-вторых, можно надеяться, что поправки, привносимые дальнедействующими взаимодействиями между дислокационными сегментами, приведут к лучшему согласию результатов компьютерных и реальных экспериментов.

### Сравнение результатов компьютерных экспериментов с данными электронно-микроскопических исследований

Основываясь на закономерностях поведения распределений по  $\varphi_i$ , изложенных выше, попытаемся проанализировать электронно-микроскопические изображения дефектной структуры. В качестве основной задачи поставим следующую: на основании распределений по  $\varphi_i$ , полученным из электронно-микроскопических изображений дефектной структуры и компьютерных экспериментов по моделированию движения дислокаций, оценить мощности  $\varphi_{cr}$  и относительные концентрации дефектов





Рис. 6. Фрагмент электронно-микроскопического изображения дефектной структуры облученного алюминия.

разного типа, а также среднее напряжение, действующее на дислокационные сегменты.

В качестве объекта исследований были выбраны образцы алюминия, облученного протонами с энергией 1 МэВ при температуре менее 100 С до дозы  $7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ . При указанных условиях в конце пробега протонов наблюдались газовые поры размером 15–300 нм и плотностью  $0.2\text{--}1.5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , а также единичные дислокации и их скопления (рис. 6). Для получения количественной информации выбирались области с порами близкого размера (15–25 нм), на которых были закреплены прогнувшиеся дислокации, расположенные под малым углом к поверхности образца, что проверялось стереоскопическим анализом. Кроме того, прогибание протяженных дислокаций имело место при их взаимодействии с „торчковыми“ дислокациями, ориентированными перпендикулярно поверхности и невидимыми в данных дифракционных условиях (рис. 7). В основном их присутствие отмечалось не столько визуально, сколько за

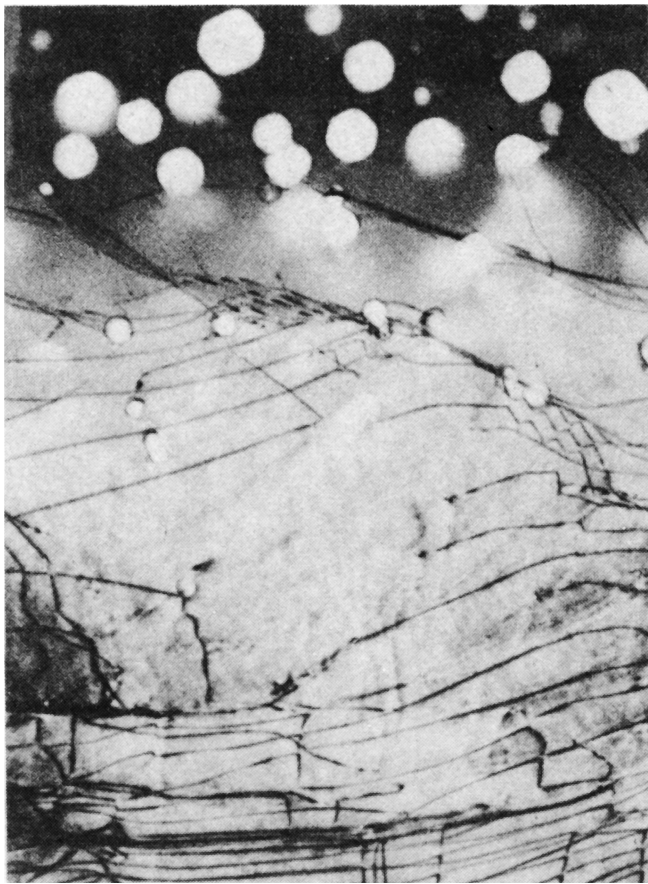


Рис. 7. Фрагмент дислокационной структуры облученного алюминия.

счет характерного изгиба протяженных дислокаций. В связи с этим набрать необходимую статистику для достоверной оценки концентрации барьеров этого типа в данном случае не представляется возможным.

Таким образом, можно полагать, что в данном случае дефектная структура состоит преимущественным образом из препятствий двух типов и дислокаций, расположенных поодиночке или в виде небольших дислокационных скоплений. Кроме того, на основании этих электронно-микроскопических данных можно считать, что предположения барьерной модели (I, II) могут быть приняты.

Информация, получаемая из электронно-микроскопических снимков, дает возможность установить плотность и средний размер пор и построить распределение по углам прогибания дислокационных сегментов  $\varphi_i$ . Из этих распределений мы попытаемся определить мощность дефектов разного типа  $\varphi_{cr}^1$  и  $\varphi_{cr}^2$ . Далее, используя их в качестве исходных параметров компьютерного эксперимента, найдем  $\kappa$ , имеющие критический угол срыва  $\varphi_{cr}^1$  ( $\kappa$  — относительная концентрация пор) и среднее напряжение, действующее на дислокационные сегменты. Основным критерием правильности проведенных оценок будем считать совпадение соответствующих распределений по  $\varphi_i$ .

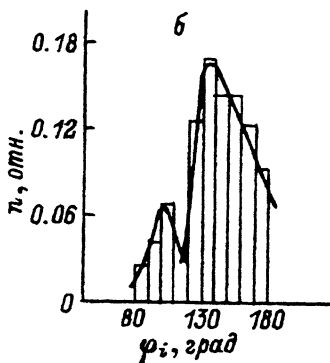
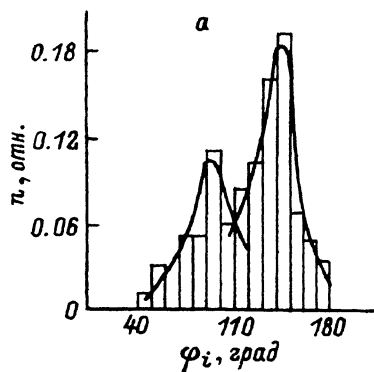


Рис. 8. Распределения по  $\varphi_i$ , полученные (а) из анализа электронно-микроскопических изображений дефектной структуры облученного алюминия и (б) компьютерного эксперимента.

Распределение по  $\varphi_i$ , полученное из электронно-микроскопических изображений, приведено на рис. 8,а. Вид распределения является характерным для препятствий двух типов и позволяет достаточно однозначно оценить  $\varphi_{cr}^1$  и  $\varphi_{cr}^2$ . Ясно, что их значения определяются величиной углов ( $\varphi_i$ ), расположенных во фронте соответствующих пиков. В качестве  $\varphi_{cr}^1$  и  $\varphi_{cr}^2$  приняты значения 2.2 и 1.4 рад для газовых пор и "торчковых" дислокаций соответственно. С использованием этих данных проведены компьютерные эксперименты (по методике, описанной в предыдущих разделах) при различных значениях  $\kappa$  и  $\tau_{ex}$ . Шаг по  $\kappa$  составлял 0.1 от общей концентрации, напряжение варьировалось с шагом 0.01 от  $\tau_{cr}$ .

Оказалось, что лучшее согласие между распределениями, полученными из компьютерных экспериментов и электронно-микроскопических наблюдений, имеет место при  $\kappa = 0.7$  и  $\tau = 0.6\tau_{cr}$  (рис. 8,б). Основные отличия полученного распределения от экспериментально наблюдаемого заключаются в том, что первый пик имеет почти в два раза меньшую высоту, а фронт спадаения второго пика менее симметричен, чем в исходном распределении. Однако мы остановились на выбранных параметрах, так как при больших  $\kappa$  высота первого пика становится еще меньше, а при меньших (с учетом выбранного шага по  $\kappa$ ) пики становятся соизмеримыми по высоте. С ростом напряжения свыше  $0.6\tau_{cr}$  возрастает величина первого пика, но форма пиков искажается еще больше, стремясь к виду, показанному на рис. 4,а. При  $\tau < 0.6\tau_{cr}$  пики начинают сливаться.

Таким образом, согласие между информацией, полученной из электронно-микроскопических наблюдений, и результатами компьютерных экспериментов дает основание считать торможение скользящих дислокаций локальными дефектами одним из основных механизмов деформации при  $\tau_{ex} < \tau_{cr}$ . Наряду с этим следует отметить, что полного количественного совпадения получить не удалось, что свидетельствует, на наш взгляд, о необходимости учета других возможных механизмов деформации. Кроме того, данный вывод справедлив, если наблюдаемая дефектная структура позволяет говорить о приемлемости основных предположений, используемых в соответствующих расчетах.