

КИНЕМАТИКА ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ

© Г.А.Малыгин

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Поступила в Редакцию 12 февраля 1996 г.
В окончательной редакции 11 марта 1996 г.)

Выведены уравнения кинематики дислокаций, описывающие изменение со временем ориентации и направления движения локальных участков дислокационных линий при трехмерном консервативном перемещении дислокаций в произвольном поле напряжений. Уравнения сформулированы применительно к проблеме статистического усреднения дислокационного ансамбля в деформируемом кристалле.

Переход от микроскопического, дискретно-дислокационного описания пластичности и прочности кристаллических тел к макроскопическому описанию их пластических и прочностных свойств предполагает в качестве необходимого и закономерного шага статистическое усреднение дислокационного ансамбля в деформируемом материале.

Особенность дислокационного ансамбля как объекта усреднения состоит в том, что составляющие его «частицы» являются не точечными, а линейными образованиями произвольной формы и длины, поэтому при описании и усреднении ансамбля наряду с координатами r и скоростями v дислокаций необходимо указывать также ориентацию ν дислокационных линий и ее изменение под действием тех или иных силовых факторов, таких, например, как внешнее приложенное к кристаллу напряжение, внутренние напряжения от других дислокаций ансамбля, влияние на ориентацию дислокаций процесса их взаимодействия с различными препятствиями в кристалле. Для этого требуется сформулировать соответствующие уравнения, описывающие эти изменения.

Другая особенность дислокационного ансамбля — это малая величина массы дислокации, в результате которой динамические эффекты, связанные с движением дислокаций, не играют существенной роли за исключением, может быть, случаев импульсного, ударного нагружения материала. При обычных условиях нагружения движение дислокаций имеет квазистатический характер, при котором приложенные к дислокации напряжения уравниваются зависящей от скорости дислокации силой трения. В результате при описании движения дислокаций на первый план выходит не динамический, а кинематический аспект этого движения, определяющий направление перемещения дислокации, ее ориентацию и положение в пространстве в каждый момент времени и изменение длины дислокации со временем.

Целью настоящей работы является вывод соответствующих уравнений, описывающих этот кинематический аспект движения дислокаций. Уравнения формулируются применительно к проблеме статистического усреднения дислокационного ансамбля, т. е. для произвольно малых сегментов дислокационных линий с локальными значениями их скоростей v (направлений движения ξ) и ориентаций ν при произвольном трехмерном перемещении линии дислокации. В первом разделе работы дано описание функции распределения дислокаций по этим параметрам и сформулированы уравнения эволюции для нее, во втором выведены уравнения кинематики дислокационных линий и продемонстрировано их применение для некоторых простых движений дислокаций. В имеющихся сейчас работах, посвященных статистическому усреднению дислокационного ансамбля в виде ламинарно текущей двумерной «дислокационной жидкости» [1] или «кулоновского газа» дислокационных частиц [2], учитывался лишь динамический аспект движения дислокаций и их распределение по скоростям. Это не позволяет рассмотреть на микроскопическом уровне, например, процессы размножения и диффузии дислокаций в результате взаимодействия дислокаций с различными препятствиями в кристалле. Эти процессы играют важную роль в эволюции ансамбля в реальных условиях пластической деформации [3].

1. Функция распределения дислокаций

С учетом топологической особенности дислокаций как линейных образований функция распределения дислокаций с данным вектором Бюргера b должна содержать в качестве дополнительной переменной ориентацию ν дислокационной линии $f_b = f_b(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \nu, t)$. При действии на дислокационный ансамбль внешних и внутренних сил, в том числе и стохастического характера, функция распределения будет эволюционировать со временем t в соответствии с уравнением типа уравнения Лиувилля [4]

$$\frac{\partial f_b}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{r}}(\mathbf{v} f_b) + \operatorname{div}_{\mathbf{v}}(\dot{\mathbf{v}} f_b) + \operatorname{div}_{\nu}(\dot{\nu} f_b) = [\dot{f}_b]_s. \quad (1a)$$

Производные по времени от \mathbf{r} , \mathbf{v} и ν описывают результат действия на дислокационный ансамбль внешних и внутренних напряжений. Наряду с действием дислокационных источников и процессом размножения дислокаций $[\dot{f}_b]_s$, они вызывают перераспределение дислокаций в конфигурационном пространстве скоростей \mathbf{v} (направлений движения ξ), ориентаций ν и положений \mathbf{r} в пространстве.

Поскольку при перемещении дислокаций динамические эффекты малы, то, как уже было сказано выше, при движении дислокаций в поле произвольных сил представляет интерес не столько распределение дислокаций по абсолютным значениям скоростей v , сколько их распределение по направлениям движения. Поскольку $\mathbf{v} = \xi v$, то имеем $\dot{\mathbf{v}} = \xi \dot{w} + \dot{\xi} v \approx \dot{\xi} v$, где w — ускорение. Подставляя $\dot{\mathbf{v}}$ в (1a), получаем для функции распределения дислокаций $f_b(\mathbf{r}, \xi, \nu, t)$ уравнение

$$\frac{\partial f_b}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{r}}(\mathbf{v} f_b) + \operatorname{div}_{\xi}(\dot{\xi} v f_b) + \operatorname{div}_{\nu}(\dot{\nu} f_b) = [\dot{f}_b]_s. \quad (1b)$$

В случае плоского (двумерного) движения в своих плоскостях скольжения ориентации дислокаций и направления их перемещения оказываются кинематически жестко связаны и статистически зависимы, поэтому вклад ξ в эволюцию функции распределения отсутствует. В общем случае трехмерного перемещения дислокаций с выходом из своих плоскостей скольжения, например в результате поперечного скольжения винтовых участков дислокаций, ориентация и направление движения дислокаций хотя и остаются кинематически связаны, но выступают в качестве статистически независимых переменных. Их распределение в дислокационном ансамбле описывается уравнением (1b).

Для его решения необходимо знать, как под действием тех или иных сил изменяются со временем ориентация и направления движения локальных участков движущихся дислокационных линий. При пренебрежении динамической составляющей этих сил уравнение баланса напряжений, действующих на дислокацию при ее консервативном перемещении, имеет известный вид

$$(\hat{\sigma}^e + \hat{\sigma}^d + \hat{\sigma}^i) \mathbf{b} \times \boldsymbol{\nu} = \xi (\tau^* + \tau_0) \mathbf{b}, \quad (2)$$

где $\hat{\sigma}^e$ — приложенное к кристаллу напряжение, $\hat{\sigma}^d$ — поле дальнедействующих напряжений от других дислокаций ансамбля, $\hat{\sigma}^i$ — локальные дальнедействующие напряжения, связанные со взаимодействием дислокаций с различными препятствиями в кристалле, $\mathbf{b} = |\mathbf{b}|$, $\tau^* = \tau^*(v, T)$ — зависящее от температуры T и скорости дислокаций v напряжение трения при квазистатическом термоактивированном движении дислокаций, τ_0 — атермическая компонента напряжений трения при взаимодействии дислокаций с препятствиями с коротким радиусом действия.

Уравнение баланса напряжений (2) определяет направление движения дислокации ξ и абсолютную величину скорости дислокации v . Но оно не определяет, как изменяются со временем ориентация и направление движения дислокации. Именно эти изменения обуславливают эволюцию функции распределения и кинетические свойства дислокационного ансамбля. Чтобы найти $\dot{\nu}$ и $\dot{\xi}$, необходимо иметь для них кинематические соотношения при произвольном трехмерном перемещении дислокации.

2. Кинематика дислокационных линий

Перемещение дислокации в пространстве состоит в общем случае из ее смещения $\mathbf{r}_0(t)$ относительно самой себя и изменения формы дислокационной линии (см. рисунок)

$$\mathbf{r}'(t) = \dot{\mathbf{r}}_0(t) + \dot{\mathbf{r}}[l(t)]. \quad (3)$$

Радиус-вектор $\mathbf{r}(l)$ описывает изменение формы дислокации при перемещении точки O_2 вдоль дислокации на расстояние $l(t)$.

Для описания эволюции формы линии, а значит, и ее локальной ориентации удобно ввести связанный с ней подвижной репер, состоящий из орта касательной к линии дислокации $\boldsymbol{\nu}$, орта ξ в направлении

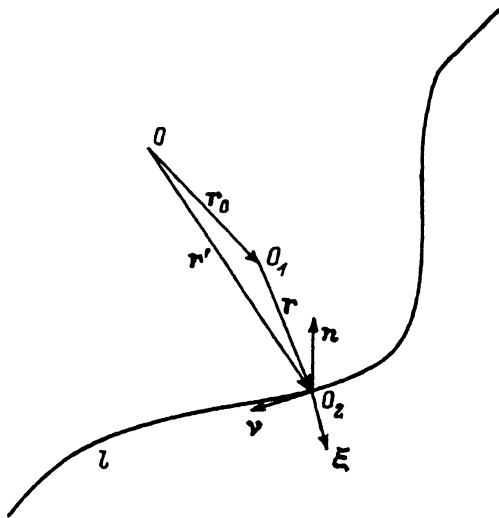


Схема трехмерного движения дислокации l в произвольном поле напряжений.

движения дислокации и орта $\mathbf{n} = \boldsymbol{\nu} \times \boldsymbol{\xi}$ нормали к плоскости скольжения дислокации (см. рисунок). В естественных координатах, связанных с линией дислокации, между этими ортами, как и для любой пространственной кривой, существуют дифференциальные соотношения Френе–Серре [5]

$$\boldsymbol{\nu} = \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial l}, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\nu}}{\partial l} = \frac{\boldsymbol{\xi}}{R_1},$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial l} = -\frac{\boldsymbol{\nu}}{R_1} + \frac{\mathbf{n}}{R_2}, \quad \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial l} = -\frac{\boldsymbol{\xi}}{R_2}, \quad (4a)$$

где $\partial/\partial l$ — производные от векторов вдоль линии дислокации, R_1 и R_2 — соответственно радиусы кривизны и кручения дислокационной линии,

$$R_1^{-1} = \boldsymbol{\xi} \frac{\partial \boldsymbol{\nu}}{\partial l} = \left[\frac{\partial \boldsymbol{\nu}}{\partial l} \frac{\partial \boldsymbol{\nu}}{\partial l} \right]^{1/2}, \quad R_2^{-1} = -\boldsymbol{\xi} \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial l} = \left[\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial l} \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial l} \right]^{1/2}. \quad (4b)$$

При плоском движении дислокационной линии без выхода из первоначальной плоскости скольжения имеем $\partial \mathbf{n} / \partial l = 0$, $R_2 = \infty$.

С учетом (4a) радиус-вектор (3) может быть записан в виде интеграла вдоль линии дислокации

$$\boldsymbol{r}'(t) = \boldsymbol{r}_0(t) + \int \boldsymbol{\nu} dl. \quad (5)$$

Дифференцируя (5) по времени, находим скорость перемещения локального участка дислокации

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}_0 + \int \dot{\boldsymbol{\nu}} dl, \quad \dot{\boldsymbol{\nu}} = \partial \boldsymbol{\nu} / \partial t = (\boldsymbol{\nu} \nabla) \boldsymbol{v}, \quad (6)$$

где v_0 — скорость поступательного движения линии дислокации, $\dot{\nu}(l)$ — скорость изменения ориентации линии дислокации из-за существования вдоль нее градиента скорости дислокации $\partial v / \partial l$. Поскольку $v = \xi v$, то

$$\dot{\nu} = v \frac{\partial \xi}{\partial l} + \xi \frac{\partial v}{\partial l}. \quad (7a)$$

В результате с учетом соотношений (4a) имеем

$$\dot{\nu} = -\frac{v}{R_1} \nu + \frac{\partial v}{\partial l} \xi + \frac{v}{R_2} n. \quad (7b)$$

Из уравнения (7b) видно, что вектор $\dot{\nu}$ имеет три составляющие. Первая из них связана с кривизной линии дислокации, вторая — с градиентом абсолютной величины скорости дислокации вдоль линии дислокации, третья — с кручением линии дислокации при ее выходе из исходной плоскости скольжения.

Аналогично может быть найдено уравнение для $\dot{\xi}$. Для этого продифференцируем по времени вытекающее из соотношений (4a) тождество $\xi = R_1 \partial \nu / \partial l$. Тогда с учетом соотношений (4a) и (7b) получаем

$$\begin{aligned} \dot{\xi} = & - \left[\frac{\partial v}{\partial l} + R_1 \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{v}{R_1} \right) \right] \nu + \\ & + \left[\frac{\dot{R}_1}{R_1} + R_1 \frac{\partial^2 v}{\partial l^2} - \frac{v}{R_1} - \frac{R_1}{R_2^2} v \right] \xi + \left[\frac{R_1}{R_2} \frac{\partial v}{\partial l} + R_1 \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{v}{R_2} \right) \right] n. \end{aligned} \quad (8a)$$

С другой стороны, дифференцируя тождество

$$R_1^{-2} = \frac{\partial \nu}{\partial l} \frac{\partial \nu}{\partial l},$$

находим, принимая во внимание (4a) и (7b),

$$\dot{R}_1 = -R_1^2 \xi \frac{\partial \dot{\nu}}{\partial l} = \left(1 + \frac{R_1^2}{R_2^2} \right) v - R_1^2 \frac{\partial^2 v}{\partial l^2}. \quad (8b)$$

Подставляя (8b) в (8a), получаем, что выражение, стоящее в квадратной скобке перед ортом ξ , в этом уравнении тождественно равно нулю. Используя далее второе из соотношений (4b) и то, что орт нормали к плоскости скольжения есть $n = \nu \times \xi$, можно аналогично $\dot{\xi}$ и \dot{R}_1 найти величины \dot{n} и \dot{R}_2

$$\dot{n} = -\frac{v}{R_2} \nu - \left[\frac{R_1}{R_2} \frac{\partial v}{\partial l} + R_1 \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{v}{R_2} \right) \right] \xi - \frac{v}{R_1} n, \quad (8c)$$

$$\dot{R}_2 = -R_2^2 \frac{\partial}{\partial l} \left[\frac{R_1}{R_2} \frac{\partial v}{\partial l} + R_1 \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{v}{R_2} \right) \right]. \quad (8d)$$

Уравнения (7b) и (8a)–(8d) образуют систему из пяти кинематических уравнений для пяти неизвестных величин ν , ξ , n и R_1 , R_2 . Поскольку $n = \nu \times \xi$, то независимыми являются четыре уравнения, и соответственно независимы четыре из пяти переменных. Уравнения определяют изменение со временем ориентаций и направлений консервативного скольжения дислокаций в произвольном поле напряжений. Зная положение дислокации в пространстве, т.е. ее форму, можно найти изменение длины дислокации при ее движении в поле напряжений.

Как видно из уравнений, источником этих изменений является производная от скорости дислокации вдоль линии дислокации. Поэтому для решения уравнений необходимо присоединить к ним уравнение баланса действующих на дислокацию напряжений (2). Умножая его скалярно на ξ , получаем

$$b\tau^*(v) = n(\hat{\sigma}^e + \hat{\sigma}^d + \hat{\sigma}^i)b - b\tau_0. \quad (9)$$

Поскольку $v = v(\tau^*)$, имеем

$$\frac{\partial v}{\partial l} = v \left[\frac{\partial \ln v}{\partial \tau^*} \right] \frac{\partial \tau^*}{\partial l}, \quad b \frac{\partial \tau^*}{\partial l} = n \frac{\partial \hat{\sigma}}{\partial l} b + \frac{\partial n}{\partial l} \hat{\sigma} b. \quad (10a)$$

Здесь $\partial \tau^* / \partial \ln v$ — коэффициент скоростной чувствительности напряжений течения, $\hat{\sigma} = \hat{\sigma}^e + \hat{\sigma}^d + \hat{\sigma}^i$. Принимая во внимание (4a), находим, что

$$\frac{\partial n}{\partial l} \hat{\sigma} b = -\frac{\xi \hat{\sigma} b}{R_2}. \quad (10b)$$

Таким образом, согласно (10), источниками, вызывающими изменение ориентации и направления движения дислокаций, являются градиенты внешних и внутренних напряжений, действующих на дислокацию, и «кручение» (изменение) плоскости скольжения дислокаций (10b). Следует заметить также, что при смещении дислокации параллельно самой себе со скоростью $v_0 = \xi_0 v_0$ по аналогии с $\dot{\nu}$ имеем $\dot{\xi}_0 = (\xi_0 \nabla)v$, т.е. возможно изменение направления скольжения дислокации без изменения ее ориентации. При консервативном движении дислокаций такая ситуация имеет место, например, при выходе достаточно протяженных винтовых участков дислокаций в плоскость поперечного скольжения.

В заключение продемонстрируем применение кинематических соотношений (7)–(9) для описания эволюции простейшего дислокационного ансамбля в виде одиночной круглой дислокационной петли, расширяющейся или сужающейся в своей плоскости скольжения.

Согласно (7), (8), для произвольного участка петли с учетом того, что $R_2^{-1} = 0$, $\partial v / \partial l = 0$, $R_1 = R$, где R — радиус петли, имеем

$$\dot{\nu} = -\frac{v}{R}\nu, \quad \dot{\xi} = 0, \quad \dot{R} = v. \quad (11)$$

Постоянство радиуса кривизны вдоль петли предполагает, согласно уравнениям движения (9), (10), отсутствие градиентов внешних и внутренних напряжений вдоль нее. В однородном поле внешних напряжений зависимость скорости отдельного участка круглой петли $v(\tau^*)$ от

координат определяется в этом случае только радиальной составляющей силы натяжения дислокации (в пренебрежении его анизотропией)

$$\tau^* = \tau - K \frac{\mu b}{R} - \tau_0. \quad (12)$$

Здесь τ — приложенное касательное напряжение, μ — модуль сдвига, K — коэффициент, зависящий в общем случае от ориентации дислокации. Таким образом, имеем $\dot{R} = v(R)$. Интегрируя это уравнение, находим зависимость кривизны (радиуса) петли от времени. Соответственно, согласно (11), может быть найдена зависимость ориентации дислокации ν от времени.

Подставляя (11) в (1b), получаем уравнение эволюции для функции распределения сегментов петли по ориентациям $f = f(\mathbf{r}, \nu, t)$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{r}}(\mathbf{v}f) - \operatorname{div}_{\nu} \left(\frac{v}{R} \nu f \right) = [f]_s. \quad (13a)$$

После усреднения (13a) по всем ориентациям ν имеем для функции распределения дислокаций по координатам $f(\mathbf{r}, t)$ уравнение сохранения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{r}}(\mathbf{v}f) = -\frac{v}{R} f. \quad (13b)$$

При усреднении учтено, что $[f]_s = -f/t_s$, $t_s = R/v$ — время релаксации (размножения) дислокации,

$$f(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \nu, t)(d\nu),$$

$$\int \operatorname{div}_{\nu}(\nu f(\mathbf{r}, \nu, t))(d\nu) = \int f \nu ds_{\nu} = 0, \quad (13c)$$

где $(d\nu)$ и ds_{ν} — соответственно элементы объема и поверхности в конфигурационном пространстве ориентаций. Уравнение (13b) совпадает с уравнением баланса для скалярной плотности дислокаций [3].

Действительно, из уравнения непрерывности вектора Бюргера для одиночной дислокации

$$\frac{\partial \hat{\alpha}}{\partial t} + \operatorname{rot}[\hat{\alpha} \times \mathbf{v}] = 0, \quad \operatorname{div} \hat{\alpha} = 0 \quad (14a)$$

следует уравнение баланса для ориентированной линии дислокации [3]

$$\frac{\partial \delta(l)}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes \delta(l)) = (\delta(l) \nabla) \mathbf{v}. \quad (14b)$$

Здесь $\hat{\alpha} = \mathbf{b} \otimes \delta(l)$, $\delta(l) = \nu \delta(l)$ и $\delta(l)$ — дельта-функции, определенные соответственно на ориентированной и неориентированной линии дислокации, ν — как и выше, орт касательной к линии дислокации. Правая часть уравнения (14b) равна $\delta(l) \partial \mathbf{v} / \partial l = \dot{\nu} \delta(l)$. Она описывает

изменение ориентации и длины дислокации в результате существования вдоль дислокации градиента скорости дислокации. Умножая (14b) скалярно на ν и учитывая (7b) и то, что $\nu \partial \nu / \partial t = 0$, поскольку $\nu \nu = 1$, получаем

$$\frac{\partial \delta(l)}{\partial t} + \operatorname{div}(\nu \delta(l)) = -\frac{v}{R_1} \delta(l) + \frac{v}{R_2} (\nu n') \delta(l). \quad (14c)$$

Правая часть уравнения (14c) описывает изменение длины дислокации в результате существования вдоль нее градиента скорости и изменения плоскости скольжения (n' — орт новой плоскости скольжения). Для круглой плоской петли $R_1 = R$, $R_2^{-1} = 0$. Из сравнения уравнений (7) и (14b) следует, что величина $\dot{\nu}$ в (7) равна $d\nu/dt$ и включает изменение не только ориентации, но и длины дислокации.

В дальнейшем с помощью полученных соотношений предполагается произвести статистическое усреднение дислокационного ансамбля с учетом короткодействующего и дальнедействующего взаимодействий дислокаций друг с другом и с различными препятствиями в кристалле с целью получения уравнений эволюции для средних по ансамблю скалярной и тензорной плотностей дислокаций.

Список литературы

- [1] H. Zorski. *Int. J. Sol. Struct.* **4**, 10, 959 (1968).
- [2] Yu.I. Mescheryakov, E.I. Procuratova. *Int. J. Sol. Struct.* **32**, 12, 1711 (1995).
- [3] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **37**, 1, 3 (1995).
- [4] А.А. Власов. *Нелокальная статистическая механика*. Наука. М. (1978). 264 с.
- [5] Г. Корн, Т. Корн. *Справочник по математике*. Наука. М. (1968). 720 с.