

Статистическое описание формы движущейся дислокации

© В.М. Чернов, Е.И. Персиянова

Всероссийский научно-исследовательский институт неорганических материалов им. акад. А.А. Бочвара,
123060 Москва, Россия

E-mail: chernovv@bochvar.ru

(Поступила в Редакцию 12 июля 2007 г.)

В окончательной редакции 21 августа 2007 г.)

Теоретически исследуется форма и подвижность дислокации при ее скольжении (переползании) по кристаллическому рельефу. Подвижность дислокации определяется вероятностью зарождения на ней критических зародышей разной природы (двойной перегиб или отрыв от барьера при скольжении, ступенька при поглощении (испускании) атома (вакансии) при переползании и др.). Показано существование переходного и стационарного движений дислокации (переходной и стационарной деформации), вычислены скорость и время достижения стационарного движения дислокации в отсутствие и в присутствии центров закрепления (торможения) разной природы. Введение центров закрепления качественно изменяет характер стационарной скорости дислокации и увеличивает время ее достижения.

PACS: 61.72.Bb, 61.72.Lk

1. Введение

При рассмотрении проблемы прочности и пластичности кристаллов при разных термомеханических и радиационных режимах нагружения всегда возникают задачи о консервативном (скольжение) и/или неконсервативном (диффузионное переползание и др.) движениях дислокации (вообще границ/фронтов разной природы). Рассматриваются задачи об исследовании формы и эффективной скорости (переходной или стационарной) дислокации, формируемых образованием критических зародышей (двойных перегибов, атомных ступенек, отрывов от центров закрепления и др.), и их последующего роста. Время образования и расширения (роста) таких зародышей, их столкновение (аннигиляция перегибов, ступенек и др.) между собой и торможение на дефектах различной природы определяют форму фронта дислокации. Тем же определяются скорость дислокации $V(t)$ и скорость деформации кристалла $d\varepsilon/dt$, связанные известным соотношением $d\varepsilon/dt = \rho bV(t)$, где ρ — плотность двигающихся дислокаций, b — их вектор Бюргерса, t — время.

Общий вероятностный подход к решению таких задач предложен в [1], где решена задача о массовой кристаллизации в объеме (росте новой фазы) и вычислено время полной кристаллизации расплава (при некоторых общих предположениях о механизме кристаллизации). Этот метод развивался в последующих работах по кристаллизации [2,3] и движению дислокации [4]. Рассмотренная в [1] задача состоит в следующем (на примере плоской модели перемещения фронта дислокации [5]). Имеется некоторый целиком заполненный ряд (прямолинейная дислокация, нулевой ряд), на котором с некоторой вероятностью возникают зародыши (двойные перегибы, ступеньки). Образовавшиеся зародыши, высота которых равна расстоянию между рядами, разрастаются вдоль ряда с некоторой скоростью (до столкновения

со встречными перегибами, до остановок на дефектах и др.) и заполняют с течением времени следующий ряд. Вычисляется вероятность заполнения произвольной точки первого ряда к заданному моменту времени. Эта вероятность определяет долю заполнения ряда к тому же моменту времени. В [1] не рассмотрен процесс, когда на образовавшемся и расширяющемся зародыше могут образовываться новые зародыши, т.е. не рассматривается вероятностное заполнение последующих слоев (второго, третьего и др.). В этом многослойном случае фронт перемещения имеет ступенчатую форму [2–4].

В настоящей работе, следуя [2–5], мы рассматриваем задачу о форме и скорости перемещения ступенчатого фронта на примере перемещения линии дислокации по потенциальному рельефу кристаллической решетки (рельеф Пайерлса) при воздействии внешнего напряжения. Зародышами в новом ряду, возникающими на линии дислокации, служат двойные перегибы [5–12], выбрасываемые в соседнюю потенциальную долину (вообще говоря, это могут быть и солитоны [8,12]). Тангенциальный рост (боковое расширение) образовавшегося перегиба (заполнение ряда боковым движением) в новом ряду происходит с некоторой скоростью, определяемой разными причинами, а именно типом решетки, значениями напряжения и температуры, примесными и собственными дефектами. Боковое расширение перегиба происходит в обоих направлениях до столкновений со встречными перегибами или до остановки по другим причинам. Линия дислокации считается неограниченной. Шириной зародившегося двойного перегиба (критической шириной) пренебрегают. Высота перегиба полагается равной расстоянию между рядами. Дислокация начинает двигаться в момент времени $t = 0$, последовательно проходит n долин (последовательные ряды $n = 1, 2, 3, \dots$). Значение $n = 0$ соответствует начальному положению дислокации при $t = 0$. Дислокация проходит некоторую переходную стадию неустановившегося

движения и затем стадию стационарного движения (если реализуется). Расстояния между долинами считаются эквидистантными (единичными).

2. Движение дислокации

В качестве основной функции, характеризующей перемещение фронта дислокации, рассматривается функция $f_n(t)$, определяющая вероятность заполнения произвольной точки n -го ряда в момент времени t . Точки ряда, которые достигает или прошла дислокация, считаются заполненными. Для бесконечного ряда эта функция, очевидно, не зависит от выбора точки ряда. Выведем уравнение, связывающее $f_n(t)$ и $f_{n+1}(t)$, следуя общему подходу [1–5]. Если известно, что точка x ряда $(n + 1)$ к моменту времени t' не заполнена, то, для того чтобы она была заполнена к моменту времени t ($0 \leq t' \leq t$), необходимо возникновение хотя бы одного двойного перегиба в n -м ряду. Момент возникновения такого перегиба t' и точка возникновения x' должны удовлетворять условию

$$|x - x'| \leq \int_{t'}^t c dt, \quad (1)$$

где $c(t)$ — скорость бокового движения перегиба (зародыша), так как при этом условии разрастающийся двойной перегиб к моменту времени t пройдет точку x в $(n + 1)$ -м ряду. Вероятность возникновения двойного перегиба в n -м ряду на участке $(x', x' + \Delta x')$ в промежуток времени от t' до $t' + \Delta t'$ равна произведению вероятности рождения двойного перегиба (ω — плотность вероятности) и вероятности того, что к моменту времени t' дислокация уже достигла точки x' n -го ряда, т. е.

$$W_{n+1} = \omega f_n(t') \Delta x' \Delta t'. \quad (2)$$

Ушедшие вперед части дислокации (заполнение рядов с номерами, превышающими n) не оказывают влияния на заполнение точки x ряда $(n + 1)$. Соответственно вероятность невозникновения двойного перегиба в n -м ряду на том же участке за тот же промежуток времени равна

$$W'_{n+1} = 1 - \omega f_n(t') \Delta x' \Delta t'. \quad (3)$$

Разбивая длину $\int_{t'}^t c dt$ и время t на элементарные участки, для которых справедливо (3), нетрудно получить выражение для вероятности невозникновения двойного перегиба на участке $\int_{t'}^t c dt$ за время t

$$W'_{n+1} = \exp \left\{ -2 \int_0^t \omega f_n(t') \left[\int_{t'}^t c dt'' \right] dt' \right\}. \quad (4)$$

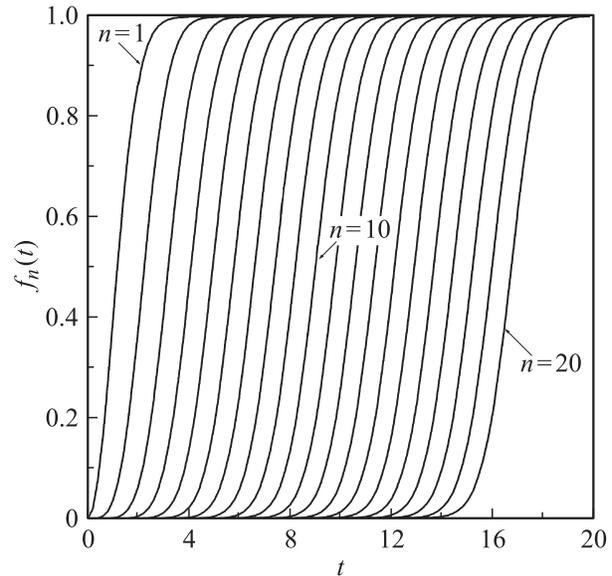


Рис. 1. Временная зависимость доли заполнения ряда с номером n , определяемой значениями функции $f_n(t)$, для разных значений n .

Так как $f_{n+1} + W'_{n+1} = 1$, из (4) следует соотношение

$$f_{n+1}(t) = 1 - \exp \left\{ -2 \int_0^t \omega f_n(t') \left[\int_{t'}^t c dt'' \right] dt' \right\}. \quad (5)$$

Скорость бокового движения перегиба $c(t)$ определяется разными причинами (напряжением, типом кристаллической решетки, силой трения и др. [5–10]). Будем считать, что эта скорость постоянна ($c(t) = c_0 = \text{const}$). Заменой переменной (изменением масштаба времени) $t \rightarrow \sqrt{2\omega c_0} t$ получим

$$f_{n+1}(t) = 1 - \exp \left[- \int_0^t (t - t') f_n(t') dt' \right]. \quad (6)$$

В силу сделанных предположений $f_0(t) = 1$, а для $n > 0$ каждая из функций $f_n(t)$ является монотонно возрастающей от нуля функцией времени. При $t \rightarrow \infty$, очевидно, $f_n(t) \rightarrow 1$. Функция $f_1(t) = 1 - \exp(-t^2/2)$ описывает заполнение первого слоя и является решением задачи об одномерной кристаллизации [1]. На рис. 1 показаны вычисленные по рекуррентному соотношению (6) величины $f_n(t)$ в зависимости от времени для различных значений n .

3. Стационарное движение дислокации

Вполне очевидно, что для установившегося процесса (если он возможен) вид функции $f_n(t)$ не зависит от номера ряда. Функция $f_{n+1}(t)$ в этом случае будет

отличаться от функции $f_n(t)$ только смещением по оси времени на некоторую постоянную величину T

$$f_{n+1}(t) = f_n(t - T). \quad (7)$$

Величина T представляет собой среднее время перемещения фронта дислокации на один ряд при стационарном процессе. Величина T подлежит определению. Ее можно определить в процессе вычисления как разность аргументов, соответствующих одному значению двух последовательных функций $f_n(t)$ и $f_{n+1}(t)$. Независимость этой разности от номера n определяет величину T . Кроме того, очевидно, что площадь T_n , ограниченная кривыми $f_n(t)$ и $f_{n+1}(t)$ и определяемая выражением

$$T_n = \int_0^{\infty} f_n(t) - f_{n+1}(t) dt, \quad (8)$$

для стационарного движения равна T . Независимость выражения (8) от n может служить критерием стационарности функции $f_n(t)$. Вычисленные по (8) значения T_n показаны на рис. 2. Видно, что с увеличением номера ряда величина T_n действительно перестает зависеть от n , т.е. в системе устанавливается стационарное движение. Но стационарное движение устанавливается лишь после того, как дислокационный фронт пройдет значительное количество (более 20) рядов. Предельное значение $T = 0.736$ достигается довольно медленно по степенному закону n^{-k} , где $k = 1.08$. Если имеется стационарное движение, т.е. выполняется условие (7), то величину T можно также определить как особую точку некоторого дифференциально-разностного уравнения. Для этого перепишем (6) в виде

$$\frac{d^2}{dt^2} \ln(1 - f_{n+1}(t)) = -f_n(t). \quad (9)$$

Для тех значений времени t (эти значения для каждого номера n различны), для которых выполняется неравенство $f_{n+1}(t) \ll 1$ (рис. 1), уравнение (9) упрощается:

$$\frac{d^2 f_{n+1}(t)}{dt^2} = f_n(t). \quad (10)$$

Уравнение (10) описывает начальный ход возрастания функции $f_{n+1}(t)$ при стационарном движении. Начальные условия очевидны:

$$f_{n+1}(0) = 0, \quad df_{n+1}(0)/dt = 0. \quad (11)$$

С учетом (7) из (10) следует дифференциально-разностное уравнение опережающего типа (с опережающим аргументом)

$$\frac{d^2 f_{n+1}(t)}{dt^2} - f_{n+1}(t + T) = 0. \quad (12)$$

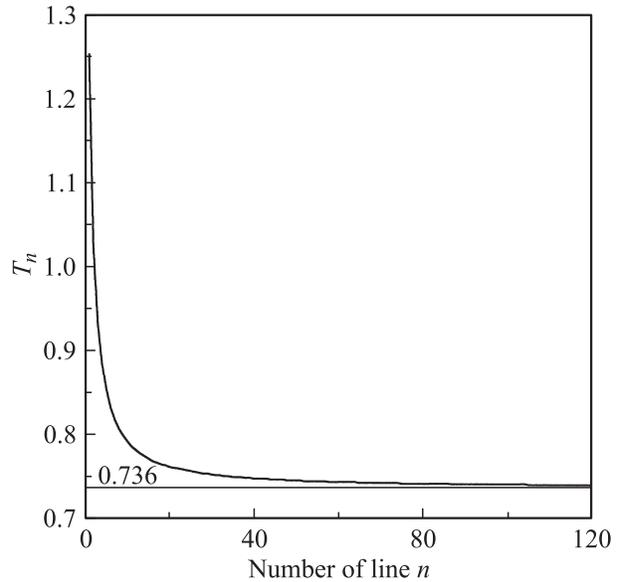


Рис. 2. Относительное изменение времени T_n заполнения соседних рядов n и $n+1$ (сдвиг по времени заполнения ряда n относительно последующего ряда $n+1$) для разных рядов при постоянной скорости бокового движения перегиба. Горизонтальной линией показано асимптотическое значение временного сдвига, равное 0.736.

Методом решения (12) является нахождение частных решений $\exp(\alpha t)$ и разложение искомого решения $f_{n+1}(t)$ в ряд по этим решениям, причем всегда существует решение вида $B \exp(\alpha t)$, где B — произвольная постоянная, $\text{Re}(\alpha) > 0$ [13].

Характеристический квазиполином для (12) имеет вид

$$\alpha^2 - \exp(\alpha T) = 0. \quad (13)$$

Максимальное значение T , при котором (13) имеет единственное и положительное решение $\alpha = e$ ($e = 2.718\dots$), равно $T = 2/e = 0.736$ (рис. 2, прямая линия). Видно, что это значение является асимптотой для значений T_n , полученных при исследовании интегрального уравнения (8). Таким образом, если возможно преобразовать интегральное уравнение (6) в дифференциально-разностное уравнение опережающего типа (12), то период стационарного движения равен максимальному значению T , при котором имеется действительное и положительное решение характеристического квазиполинома (13).¹

Скорость (безразмерная) перемещения фронта дислокации при стационарном движении равна $V = 1/T = e/2 = 1.359$. В обычных единицах измерения времени имеем [4]

$$V = \frac{e}{\sqrt{2}} (\omega c)^{1/2} = 1.92 (\omega c)^{1/2}. \quad (14)$$

¹ Заметим также, что для $t \ll 1$ из (10) следует последовательность $f_0(t) = 1$, $f_1(t) = t^2/2!$, \dots , $f_k(t) = t^{2k}/(2k)!$ ($k = 0, 1, \dots, n+1$). В этом случае разность времен t_{n+1} и t_n , при которых эти функции имеют равное значение ξ , причем $0 < \xi < 1$, определяется величиной $T_n = t_{n+1} - t_n = 2/e + O(\ln \xi/n^2)$.

Как видно из (14), скорость стационарного движения дислокации пропорциональна квадратному корню из вероятности образования двойного перегиба ω на единицу длины дислокации за единицу времени и пропорциональна квадратному корню из скорости движения перегиба c . При термofлуктуационном зарождении перегибов это будет соответствовать „эффективной“ энергии барьера, равной половине энергии барьера в обычном выражении аррениусского типа.²

4. Влияние движения перегибов с затухающей скоростью

При наличии каких-либо дополнительных препятствий (центров закрепления, вязкого торможения и др.) тангенциальному движению перегибов их скорость $c(t)$ перестает быть постоянной [8–12]. Рассмотрим случай, когда центры закрепления тормозят разбегание перегибов, не оказывая влияния на их зарождение. Пусть $c(t) = c_0 \exp(-t/\tau_0)$, где c_0 — постоянная скорость перегиба без учета торможения, τ_0 — характерное время торможения перегиба (релаксации), зависящее от конкретных условий, в том числе и от концентрации центров торможения. Очевидно, что случай $\tau_0 \rightarrow \infty$ соответствует рассмотренному в разделах 2, 3 случаю движения дислокации по кристаллическому рельефу при постоянной скорости перегиба, а случай $\tau_0 \rightarrow 0$ соответствует случаю, когда практически нет бокового движения перегибов (большая концентрация центров торможения и др.). Также пренебрегается влиянием конфигурации „нависания“, а именно перегиб в n -м ряду затормозился препятствием, а на нем в $(n + 1)$ -м ряду возник и распространяется другой перегиб, достигая места остановки перегиба в n -м ряду. Учет конфигураций нависания приведет, по-видимому, к некоторому эффективному изменению параметра τ_0 . Из (5) следует с заменой масштаба времени $t \rightarrow (2\omega c_0)^{1/2} t$

$$f_{n+1}(t) = 1 - \exp \left\{ -\tau \int_0^t f_n(t') \left[1 - \exp \left(-\frac{t-t'}{\tau} \right) \right] dt' \right\},$$

$$f_0(t) = 1, \quad (15)$$

где $\tau = (2\omega c_0)^{1/2} \tau_0$. На рис. 3 показаны вычисленные по уравнению (15) значения $f_n(t)$ в зависимости от времени для различных значений n и τ .

На рис. 4 показаны значения площадей T_n между кривыми $f_n(t)$ и $f_{n+1}(t)$ для различных значений n и τ . Исследования показали, что при $\tau > 10$ результаты практически не зависят от τ и совпадают с аналогичными результатами, полученными без учета торможения бокового движения перегибов (раздел 2). Как видно из рис. 4, с увеличением номера величина T_n перестает

² Оценка стационарной скорости дислокации, двигающейся по кристаллическому рельефу Пайерлса, когда плотность перегибов лимитируется аннигиляцией встречных разноименных перегибов, дала значение $V = \sqrt{2(\omega c)^{1/2}}$ [5–7].

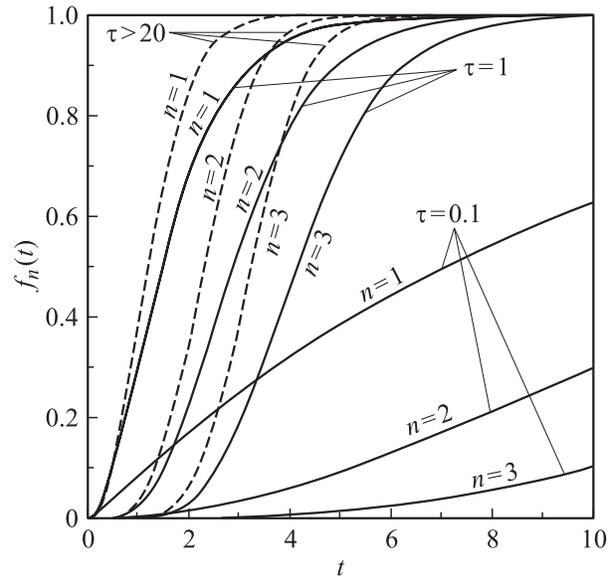


Рис. 3. Временные зависимости доли заполнения рядов, определяемых значениями функций $f_n(t)$, в отсутствие затухания скорости перегиба ($\tau > 20$) и при наличии затухания ($\tau = 0.1, 1$) для первых трех рядов ($n = 1, 2, 3$).

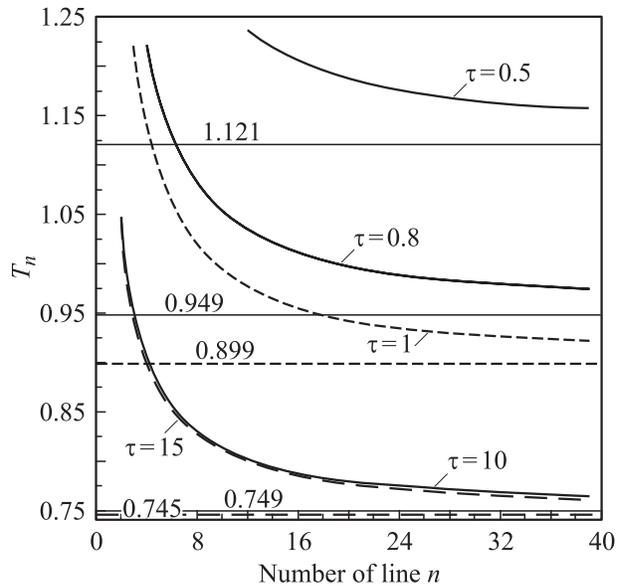


Рис. 4. Относительное изменение времени заполнения соседних рядов n и $n + 1$ (сдвиг по времени заполнения ряда n относительно последующего ряда $n + 1$) для разных рядов при наличии затухания скорости перегибов (значения τ указаны около кривых). Горизонтальными линиями показаны асимптотические значения сдвигов времени заполнения соседних рядов для соответствующих параметров затухания.

зависеть от n (устанавливается стационарное движение). Как видно из рис. 3, 4, чем меньше величина τ , тем существеннее отклонения параметров от стационарных значений и тем больше времена их достижения.

5. Стационарное движение дислокации при наличии центров торможения

Так же как и при исследовании стационарного движения дислокации по кристаллическому рельефу при постоянной скорости перегиба (раздел 3), вполне очевидно, что при затухающей скорости перегиба для установившегося процесса, если он возможен, вид функции $f_n(t)$ не будет зависеть от номера ряда при некотором относительном сдвиге. Методы нахождения стационарного движения (см. (15)) остаются такими же, как и в разделе 3. Стационарное движение достигается довольно медленно по степенному закону n^{-k} , где показатель k по величине близок к единице. С уменьшением параметра τ отмечается незначительное увеличение показателя k ($k = 1.10$ при $\tau = 10$, $k = 1.16$ при $\tau = 0.1$) и значительное увеличение количества рядов, пройденных дислокационным фронтом, до установления стационарного движения.

Те же соображения, на основе которых получено уравнение (12), дают

$$\frac{d^2 f_{n+1}(t)}{dt^2} + \tau^{-1} \frac{df_{n+1}(t)}{dt} - f_{n+1}(t + T) = 0. \quad (16)$$

Уравнение (16), как и (12), является дифференциально-разностным уравнением опережающего типа (с опережающим аргументом), решение которого при возрастании τ подобно решениям (12). Характеристический квазиполином для (16) имеет вид

$$\alpha^2 + \frac{\alpha}{\tau} - \exp(\alpha T) = 0. \quad (17)$$

Из представления (17) в виде $T(\alpha) = \ln(\alpha^2 + \alpha/\tau)/\alpha$ следует, что максимальным значением T , при котором имеется действительное и положительное решение (17) и (16), является значение $T(\alpha^*)$, где α^* является действительным корнем уравнения

$$\frac{(1 + 2\alpha\tau)}{(1 + \alpha\tau)} = \ln\left(\alpha^2 + \frac{\alpha}{\tau}\right). \quad (18)$$

Корень уравнения (18) при $\tau \rightarrow \infty$ равен $\alpha^* = e$, а при $\tau \rightarrow 0$ равен $\alpha^* = \tau e$.

Таким образом, с уменьшением времени релаксации τ (увеличение концентрации препятствий и др.) качественно меняется как характер стационарного движения, так и время его достижения. При $\tau \rightarrow \infty$ скорость стационарного движения пропорциональна квадратному корню из вероятности образования двойного перегиба (14). При $\tau \rightarrow 0$ скорость стационарного движения пропорциональна уже вероятности образования двойного перегиба $V = 1/T = \tau e$ или в обычных единицах [5]

$$V = 2e\tau_0 c_0 \omega. \quad (19)$$

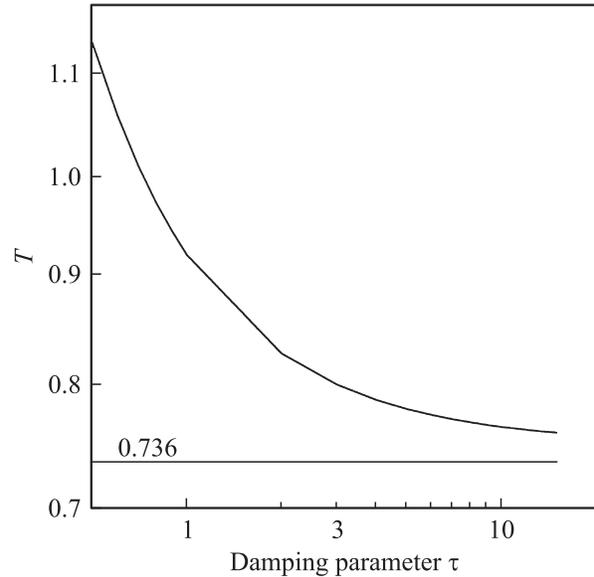


Рис. 5. Относительное изменение асимптотического значения времени заполнения ряда T в зависимости от величины затухания скорости перегиба τ . Горизонтальной линией показано асимптотическое значение времени заполнения ряда T , равное 0.736, при больших затуханиях τ .

Изменение величины времени T при стационарном движении с изменением времени релаксации τ показано на рис. 5. Хорошо видны характерные области $T \sim \tau^{-1}$ при $\tau < 1$ и $T = \text{const}$ при $\tau > 10$. На рис. 4, 5 значения T , вычисленные как особые точки дифференциально-разностного уравнения опережающего типа (16), показаны прямыми линиями.

6. Заключение

Рассмотрено движение дислокации по кристаллическому рельефу по механизму вероятностного образования двойных перегибов критических размеров. При этом задана плотность вероятности образования перегибов критических размеров. Также описано последующее боковое движение (расширение) перегибов. Рассмотрены случаи постоянной скорости перегибов, когда их перемещение ограничивается аннигиляцией встречных перегибов, и переменной скорости перегибов (затухающей по разным причинам).

После переходной стадии устанавливается стационарная скорость движения дислокации. Длительность переходной стадии и величина стационарной скорости зависят от вероятности образования и скорости разбега перегибов. Характер скорости стационарного движения изменяется качественно при переходе от случая постоянной скорости к случаю затухающей скорости движения двойного перегиба. В первом случае скорость пропорциональна квадратному корню из вероятности образования перегиба, что „эквивалентно“ половинной

величине энергии активации при термофлуктуационном движении дислокации (см. (14)). Во втором случае в пределе большого затухания скорость движения дислокации пропорциональна вероятности образования двойных перегибов, что „эквивалентно“ полной энергии активации движения дислокации (см. (19)).

Переходная и стационарная скорости дислокации зависят от начальной (стартовой) формы дислокации (в настоящей работе за начальную форму дислокации принята прямолинейная форма дислокации, но может быть принята форма дислокации с некоторым промежуточным номером n), от вероятности образования перегиба и скорости их бокового разбега. Конкретная реализация механизмов движения дислокации определяется многими причинами (типом кристаллической решетки и соответственно типом барьера Пайерлса, температурой, напряжением, концентрацией локальных собственных и примесных барьеров и др.). В совокупности будет создаваться сложная картина движения дислокации (следов выхода дислокации на поверхность кристалла и др.) и, как следствие, сложный вид кривой деформации кристалла.

Специфическая сложность движения дислокации может возникнуть при импульсном нагружении кристалла, когда подвижность дислокации и достижение стационарного движения (не всегда реализуемого) при каком-то импульсе будет зависеть от формы дислокации, полученной в предшествующем импульсе.

Обобщение полученных результатов на случаи, когда скорость движения дислокации определяется потоком на нее собственных точечных дефектов (междоузельных атомов и вакансий термической или радиационной природы [14]) или термофлуктуационным скольжением дислокации через случайное распределение центров закрепления [12,15,16], не представляет, по-видимому, принципиальной сложности. Ожидаемые результаты для этих случаев также предсказуемы, как обобщение полученных в настоящей работе результатов.

Список литературы

- [1] А.Н. Колмогоров. Изв. АН СССР. Сер. мат. **3**, 355 (1937).
- [2] Л.А. Боровинский, А.Н. Циндергозен. ДАН СССР **183**, 1308 (1968).
- [3] Л.А. Боровинский. В сб.: Исследования состояний комплексов примесных атомов в кристаллах и процессов образования кристаллических зародышей. ВГПИ, Вологда (1989). С. 44.
- [4] В.Л. Инденбом, В.М. Чернов. Статистическое описание формы движущейся дислокации. Динамика дислокаций / Под ред. В.Я. Платкова. ФТИНТ АН УССР, Харьков (1973). С. 27.
- [5] А.А. Чернов. Современная кристаллография / Под ред. Б.К. Вайнштейна и др. Т. 3. Образование кристаллов. Наука, М. (1980). С. 216.
- [6] В.Л. Инденбом, А.Н. Орлов. В сб.: Динамика дислокаций. ФТИНТ АН УССР, Харьков (1968). С. 5.
- [7] А.Н. Орлов, В.Л. Инденбом. ФММ **67**, 421 (1989).

- [8] Б.В. Петухов. ФТТ **25**, 1822 (1983).
- [9] Б.В. Петухов. Письма в ЖТФ **9**, 1486 (1983).
- [10] V.I. Alshits, V.L. Indenbom. In: Dislocations in solids / Ed. F.R.N. Nabarro. Elsevier Science Publishers B.V. (1986). P. 43.
- [11] V.L. Indenbom, B.V. Petukhov, J. Lothe. In: Elastic strain fields and dislocation mobility / Eds V.L. Indenbom, J. Lothe. Elsevier Science Publishers B.V. (1992). P. 489.
- [12] В.Л. Инденбом, В.М. Чернов. ФТТ **21**, 1311 (1979).
- [13] Р. Беллман, К. Кук. Дифференциально-разностные уравнения / Пер. с англ. Мир, М. (1967).
- [14] V.L. Indenbom, Z.K. Saralidze. In: Elastic strain fields and dislocation mobility / Eds V.L. Indenbom, J. Lothe. Elsevier Science Publishers B.V. (1992). P. 571.
- [15] В.М. Чернов. ФТТ **15**, 1159 (1973).
- [16] V.L. Indenbom, V.M. Chernov. In: Elastic strain fields and dislocation mobility / Eds V.L. Indenbom, J. Lothe. Elsevier Science Publishers B.V. (1992). P. 517.