

УДК 539.4.015.01

КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ДИСЛОКАЦИОННЫХ СТРУКТУР

Г. А. Малыгин

Сформулировано уравнение эволюции плотности дислокаций в пластически деформируемом кристалле, учитывающее процессы диффузии, размножения и аннигиляции дислокаций. С помощью уравнения обсуждается механизм возникновения пространственно-модулированных периодических дислокационных структур. Найдены условия возникновения таких структур, их форма и период и связанные с ними соотношения. Теоретические результаты сопоставляются с экспериментом.

Электронно-микроскопические наблюдения показывают [1-9], что в пластически деформированных при умеренных и низких температурах кристаллах дислокации распределены неравномерно. В зависимости от кристалла, его ориентации, степени деформации и условий нагружения могут формироваться одномерные (слоистые [3]), двумерные (решетчатые [4, 5]) или трехмерные (ячеистые [6-9]) дислокационные структуры. Выяснение механизма возникновения таких пространственно-неоднородных распределений дислокаций является актуальной задачей физики пластичности кристаллов.

Попытки установить этот механизм предпринимались в ряде работ исходя из силовых [10], энергетических [11] и кинетических [12-14] соображений. Первые два подхода не привели к успеху, так как не учитывали многих обстоятельств, которые, как показывает опыт, играют важную роль в этом явлении. В первую очередь это относится к структуре самого кристалла (наличию в нем примесей, выделений и других препятствий для дислокаций), во-вторых, к процессам, характеризующим пространственную мобильность дислокаций, т. е. способность их к поперечному скольжению, аннигиляции и размножению. Надлежащий учет этих обстоятельств, как можно предполагать, позволит найти условия, при которых однородный (ламинарный) дислокационный поток теряет устойчивость и становится пространственно-модулированным. Неоднородность распределения дислокаций, как и в других аналогичных случаях [15], должна быть результатом кинетической неустойчивости, развивающейся в ансамбле взаимодействующих частиц. В рассматриваемом случае таким ансамблем является дислокационный ансамбль, для которого необходимо сформулировать соответствующее уравнение эволюции. Формулировка этого уравнения и анализ его пространственно-периодических решений и является целью настоящей работы.

1. Уравнение эволюции плотности дислокаций

Рассмотрим ансамбль, состоящий из дислокаций с двумя типами векторов Бюргера $b_1 = b_2 = b$. Дислокации b_1 и b_2 перемещаются в пересекающихся плоскостях скольжения, угол между которыми для простоты будем считать равным $\pi/2$. Для скалярной плотности $\rho^{(i)}$ подвижных дислокаций каждого типа можно записать уравнение сохранения общего вида

$$\partial \rho^{(i)} / \partial t + \operatorname{div} j^{(i)} = \Phi_i(\rho^{(1)}, \rho^{(2)}), \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

где $j^{(i)}$ — дислокационные потоки; Φ_i — функции, описывающие процессы размножения, аннигиляции и взаимодействия дислокаций друг с другом; t — время. Будем далее предполагать, что доля винтовых участков петель, способных к размножению и аннигиляции поперечным скольжением, составляет постоянную часть от полной плотности подвижных дислокаций [16]. Направляя ось x вдоль компоненты потока $j_x^{(1)}$, а ось y — вдоль компоненты $j_y^{(2)}$ и принимая во внимание результаты [16], запишем уравнения (1) в развернутом виде

$$\frac{\partial \rho^{(1)}}{\partial t} + \left(\frac{\partial j_x^{(1)}}{\partial x} + \frac{\partial j_y^{(1)}}{\partial y} \right) = [\delta_m - \delta_0 + \delta_f \sqrt{\rho^{(2)}} - \delta_a \rho^{(1)}] v_1 \rho^{(1)}, \quad (2a)$$

$$\frac{\partial \rho^{(2)}}{\partial t} + \left(\frac{\partial j_x^{(2)}}{\partial x} + \frac{\partial j_y^{(2)}}{\partial y} \right) = [\delta_m - \delta_0 + \delta_f \sqrt{\rho^{(1)}} - \delta_a \rho^{(2)}] v_2 \rho^{(2)}. \quad (2б)$$

Здесь δ_m, δ_0 — коэффициенты соответственно размножения и иммобилизации дислокаций на препятствиях недислокационной природы; δ_f — коэффициент размножения дислокаций на дислокациях леса; δ_a — коэффициент аннигиляции дислокаций; v_i — скорость дислокаций.

В результате двойного поперечного скольжения (ДПС) винтовые дислокации способны выходить из своих плоскостей скольжения, поэтому для потоков имеем выражения [17]

$$j_x^{(1)} = v_1 \rho^{(1)}, \quad j_y^{(1)} = (\xi - 1) D_1 \frac{\partial \rho^{(1)}}{\partial y}, \quad \rho^{(1)} = \rho^{(1)}(y), \quad (3a)$$

$$j_x^{(2)} = (\xi - 1) D_2 \frac{\partial \rho^{(2)}}{\partial x}, \quad j_y^{(2)} = v_2 \rho^{(2)}, \quad \rho^{(2)} = \rho^{(2)}(x), \quad (3б)$$

где $D_i = \lambda_D v_i$ — коэффициент диффузии дислокаций; λ_D — эффективное расстояние диффузии дислокаций в результате ДПС; ξ — коэффициент, учитывающий, что двойное поперечное скольжение сопровождается размножением дислокаций (образованием новых дислокационных петель, $\xi > 1$ [17]). Подставляя (3) в (2) и учитывая, что

$$\frac{\partial j_x^{(1)}}{\partial x} = \frac{\partial j_y^{(2)}}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \rho^{(i)}}{\partial t} = \frac{\partial \rho^{(i)}}{\partial \dot{\gamma}_i} \dot{\gamma}_i, \quad (4)$$

где $\dot{\gamma}_i = b v_i \rho^{(i)}$ — скорость пластической деформации, получаем

$$\rho^{(1)} \frac{\partial \rho^{(1)}}{\partial \dot{\gamma}_1} + (\xi - 1) \frac{\lambda_D}{b} \frac{\partial^2 \rho^{(1)}}{\partial y^2} = [(z_m - z_0) + z_f \sqrt{\rho^{(2)}} - z_a \rho^{(1)}] \rho^{(1)}, \quad (5a)$$

$$\rho^{(2)} \frac{\partial \rho^{(2)}}{\partial \dot{\gamma}_2} + (\xi - 1) \frac{\lambda_D}{b} \frac{\partial^2 \rho^{(2)}}{\partial x^2} = [(z_m - z_0) + z_f \sqrt{\rho^{(1)}} - z_a \rho^{(2)}] \rho^2, \quad (5б)$$

где $(z_m - z_0) = (\delta_m - \delta_0)/b$, $z_f = \delta_f/b$, $z_a = \delta_a/b$ — коэффициенты, характеризующие интенсивность соответствующих процессов. Корневая зависимость $d\rho/d\dot{\gamma}$ от плотности дислокаций леса установлена эмпирически в [18]. Теоретический аспект этого вопроса обсуждается в [19].

Уравнения (5) описывают эволюцию плотности дислокаций в кристалле, в котором действуют не менее двух систем скольжения, т. е. описывают дислокационный ансамбль на второй и третьей стадии кривой деформационного упрочнения. Опыт показывает, что плотность дислокаций в каждой из систем скольжения на этих стадиях практически одинакова, поэтому ввиду симметрии уравнений (5) в дальнейшем достаточно проанализировать одно из них.

Для этого, считая $\rho^{(1)} = \rho^{(2)} = \rho$, $\dot{\gamma}_1 = \dot{\gamma}_2 = \dot{\gamma}$, перепишем уравнение (5б) в виде

$$\rho \frac{\partial \rho}{\partial \dot{\gamma}} + (\xi - 1) \frac{\lambda_D}{b} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = z_a \rho (\sqrt{\rho_1} - \sqrt{\rho}) (\sqrt{\rho} - \sqrt{\rho_2}), \quad (6a)$$

$$\sqrt{\rho_{1,2}} = \frac{z_f \pm [z_f^2 - 4z_a(z_0 - z_m)]^{1/2}}{2z_a}. \quad (6б)$$

Переходя затем к безразмерным переменным

$$\psi = \rho/\rho_1, \quad \Gamma = x_a \gamma, \quad X = x/\Lambda_0, \quad \Lambda_0 = [\lambda_D/b\kappa_a \rho_1]^{1/2}, \quad (7a)$$

получаем окончательно

$$\psi \frac{\partial \psi}{\partial \Gamma} + (\xi - 1) \frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} = \psi (\psi^{1/2} - \psi_0) (1 - \psi^{1/2}). \quad (7b)$$

где

$$\psi_0 = \frac{\sqrt{\rho_2}}{\sqrt{\rho_1}} = \frac{1 - \sqrt{1 - \eta}}{1 + \sqrt{1 - \eta}}, \quad \eta = \frac{4x_a(x_0 - x_m)}{x_f^2}. \quad (8)$$

2. Пространственно-модулированная дислокационная структура

Рассмотрим стационарные $\partial\psi/\partial\Gamma = 0$ решения уравнения (7b). Интегрируя его один раз при граничном условии $\partial\psi/\partial X|_{x=0} = 0$, получаем

$$(\xi - 1) \left(\frac{d\psi}{dX} \right)^2 = \psi^2 \left[-\frac{2}{3} \psi + \frac{4}{5} (1 + \psi_0) \psi^{1/2} - \psi_0 \right]. \quad (9)$$

Второе интегрирование с помощью подстановки $\psi = 1/\varphi^2$ сводится к табличному интегралу, который при условиях $\xi > 1$,

$$(1 + \psi_0)^2 - \frac{25}{6} \psi_0 > 0, \quad 0 < \psi_0 < 2/3, \quad 0 < \eta < \frac{24}{25} \quad (10a)$$

имеет пространственно-периодическое решение

$$\psi = \rho/\rho_1 = \left[\frac{5/2\psi_0}{(1 + \psi_0) - \sqrt{(1 + \psi_0)^2 - \frac{25}{6} \psi_0} \cos 2\pi \frac{x}{\Lambda}} \right]^2, \quad \Lambda = 4\pi \left(\frac{\xi - 1}{\psi_0} \right)^{1/2} \Lambda_0, \quad (10b)$$

где Λ — период решения.

Сплошная кривая на рис. 1 демонстрирует характер дислокационной структуры согласно выражению (10б). Отношение максимальной плотности дислокаций в структуре к минимальной равно

$$\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} = f^2 = \left\{ \frac{1 + \psi_0 + [(1 + \psi_0)^2 - 25/6\psi_0]^{1/2}}{1 + \psi_0 - [(1 + \psi_0)^2 - 25/6\psi_0]^{1/2}} \right\}^2. \quad (11)$$

Оно зависит только от величины параметра ψ_0 или эквивалентных ему параметров f и η (см. (8)). Они характеризуют степень пространственной неоднородности структуры.¹ При $\psi_0 \ll 1$ отношение $\rho_{\max}/\rho_{\min} \approx \psi_0^{-2} \gg 1$, а при критическом значении $\psi_0 = 2/3$ имеем $\rho_{\max}/\rho_{\min} = 1$, т. е. однородное распределение дислокаций. Следовательно, величина параметра $\psi_0 = 2/3$ соответствует точке бифуркации стационарной дислокационной структуры. Для возникновения решений, описываемых формулой (10б), необходимо также, чтобы в (7) и (8) было $\xi > 1$, $\psi_0 > 0$, т. е. чтобы диффузия дислокаций поперечным скольжением сопровождалась их размножением, а величина η была положительной. Последнее условие означает, что коэффициент иммобилизации дислокаций на препятствиях недислокационной природы x_0 должен быть больше коэффициента их размножения x_m на такого рода препятствиях.

¹ Попытки эмпирически ввести коэффициент неоднородного распределения дислокаций в ячеистой структуре предпринимались в [20, 21].

В случае, когда условия $\xi > 1$, $\eta > 0$ одновременно нарушаются, стационарным решением уравнения (7б) является решение с разрывами (штриховая кривая на рис. 1)

$$\rho/\rho_1 = \left[\frac{5/2 |\psi_0|}{(1 - |\psi_0|) + \sqrt{(1 - |\psi_0|)^2 + \frac{25}{6} |\psi_0| \cos 2\pi \frac{x}{\Lambda}}} \right]^2, \quad \Lambda = \left(\frac{1 - \xi}{|\psi_0|} \right)^{1/2} \Lambda_0. \quad (12)$$

Сейчас неясно, реализуется ли соответствующая ему структура на опыте. Поскольку наличие разрывов может быть связано с неучетом в уравнениях (5) производных более высокого порядка, чем второй, отметим, что резкие дислокационные границы наблюдались в [4, 5]. На дополнительную пространственную их модуляцию обращено внимание в [4].

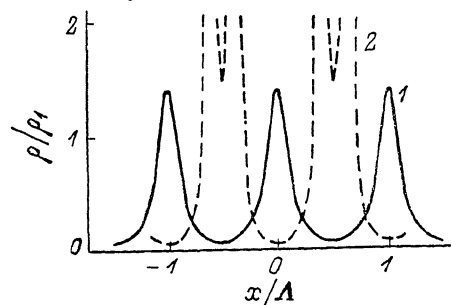


Рис. 1. Периодические дислокационные структуры.

1 — согласно (10б) при $\psi_0 = 0.2$, 2 — согласно (12) при $|\psi_0| = 0.2$.

3. Сравнение с экспериментом

Дислокационная структура (10б) соответствует третьему участку кривой деформационного упрочнения, когда параметры структуры перестают зависеть от деформации и достигают насыщения. Для сравнения ее с экспериментом перепишем (10б), учитывая соотношение (11), в виде

$$\frac{\rho(x)}{\rho_{\max}} = 1 / \left[1 + (f - 1) \sin^2 \pi \frac{x}{\Lambda} \right]^2, \quad 1 < f < \infty. \quad (13)$$

В литературе нет прямых экспериментальных данных о локальном распределении дислокаций $\rho(x)$ в границах дислокационных ячеек, поэтому

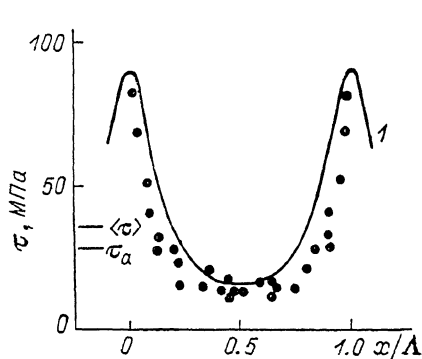


Рис. 2. Распределение локальных напряжений в границах дислокационных ячеек в монокристаллах меди при 293 К [6].

1 — согласно (14) при $f = 5.55$, $\Lambda = 1.4$ мкм.

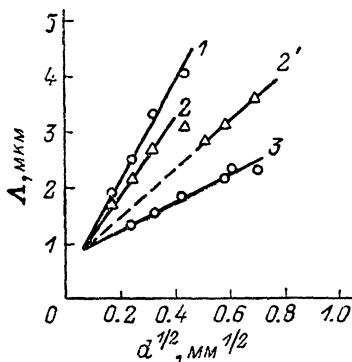


Рис. 3. Зависимость размера дислокационных ячеек в поликристаллическом алюминии 99.99 % от величины зерна при разных температурах [8].

1 — $T = 473$; 2, 2' — 293; 3 — 77 К.

воспользуемся результатами [6] по распределению локальных напряжений $\tau(x)$ в границах ячеек в кристаллах меди (рис. 2). Величина τ оценивалась в [6] по радиусу кривизны дислокационных сегментов, испускаемых различными участками границ. Так как $\tau(x) = \alpha \mu b \sqrt{\rho(x)}$, где α — коэффициент взаимодействия дислокаций, μ — модуль сдвига, то, согласно (13), имеем

$$\frac{\tau(x)}{\tau_{\max}} = \frac{1}{1 + (f-1) \sin^2 \pi(x/\Lambda)}, \quad \tau_{\max} = \alpha \mu b \rho_{\max}^{1/2}. \quad (14)$$

Кривая на рис. 2 демонстрирует хорошее соответствие зависимости (14) эксперименту [6]. На этом рисунке приведены также теоретическое значение среднего внутреннего напряжения в кристалле $\langle \tau \rangle = \alpha \mu b \langle \rho \rangle^{1/2}$, где

$$\langle \rho^{1/2} \rangle = \frac{2}{\Lambda} \int_0^{\Lambda/2} \rho^{1/2}(x) dx = \frac{\rho_{\max}^{1/2}}{f^{1/2}} = \left(\frac{3}{2} \psi_0 \rho_1 \right)^{1/2}, \quad (15)$$

и величина напряжения течения кристалла τ_a . Видно, что хотя и полного соответствия нет, но согласие между теорией и экспериментом вполне удовлетворительное. Из выражений (15) и (14) следует, что $\langle \tau \rangle = \tau_{\max} / f^{1/2} = (\tau_{\max} \tau_{\min})^{1/2}$.

Эмпирически установлено, что период структуры (размер ячеек Λ) и величина напряжения течения $\tau_a = \langle \tau \rangle$ связаны универсальной зависимостью $\tau_a = g \mu b / \Lambda$, где постоянная $g \approx 5 \div 10$ [4, 7]. С помощью соотношений (7а), (10б) и (15) находим, что для рассматриваемой дислокационной структуры теоретическое значение g равно

$$g = 4\pi \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} \alpha \left[\frac{(\xi - 1) \lambda_D}{b \alpha} \right]^{1/2}. \quad (16)$$

Параметры λ_D/b и α характеризуют разные стороны процесса микропоперечного скольжения винтовых дислокаций, поэтому они должны быть величинами одного порядка.² Полагая в (16) $\alpha = 0.5$, $\xi = 2$, $\lambda_D/b\alpha = 1$, получаем оценку $g \approx 8$, согласующуюся с экспериментом.

В качестве еще одной иллюстрации рассмотрим зависимость периода структуры Λ от размера зерна d в поликристаллах. На рис. 3 приведены результаты обработки в координатах $\Lambda \sim d^{1/2}$ зависимостей $\Lambda(d)$ для алюминия при разных температурах и степени пластической деформации $\varepsilon = 0.2$ [8]. С помощью (7а), (8) и (10б) находим, что период структуры

$$\Lambda = 4\pi \left[\frac{(\xi - 1) \lambda_D}{b(\alpha_0 - \alpha_m)} \right]^{1/2} \quad (17)$$

зависит от структурного фактора $\alpha_0 - \alpha_m$, характеризующего интенсивность размножения и иммобилизации дислокаций на препятствиях недислокационной природы. В случае поликристаллов, как показывает опыт [22, 23], такими препятствиями (и стоками [24]) для дислокаций являются границы зерен $|\alpha_0 - \alpha_m| = \beta/bd$, где коэффициент $\beta \approx 2 \div 3$. Следовательно, в соответствии с результатами [8] находим, что

$$\Lambda/b = M (d/b)^{1/2}, \quad M = 4\pi [(\xi - 1) \lambda_D / \beta b]^{1/2}. \quad (18)$$

Из наклона прямых на рис. 3 получаем оценку постоянной $M = 5 \div 15$, согласующуюся с теоретическим ее значением (18) при $(\xi - 1) \lambda_D / b = 1 \div 4$. Обращает на себя внимание, что при экстраполяции прямых $\Lambda - d^{1/2}$ к $d = 0$ они пересекаются при критических значениях $\Lambda_k = 0.9$ мкм и $d_k = 3.6$ мкм. Следовательно, при размерах зерен $d < d_k$ ячеистая структура в поликристалле не должна возникать. Это обстоятельство находит подтверждение при сверхпластической деформации ультрамелкозернистых материалов. Оно согласуется также с результатами [9]: в алюминиевых фольгах толщиной меньше 3 мкм ячеистая структура не формируется.

В заключение заметим, что, как следует из результатов работы, ячеистые дислокационные структуры по механизму своего образования могут быть отнесены к известному классу самоорганизующихся диссипативных структур.

² В металлических кристаллах $\alpha_a = 2 \div 5$ [18]. Теоретическая оценка λ_D и ξ сделана в отдельном сообщении [17].

- [1] Суон П. Р. // Электронная микроскопия и прочность кристаллов. М., 1968. С. 123—168.
- [2] Трефилов В. И., Моксеев В. Ф., Печковский Э. П. и др. Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических металлов. Киев, 1987. 248 с.
- [3] Foxall R. A., Duesberry M. S., Hirsh P. B. // *Canad. J. Phys.* 1967. V. 45. N 2. P. 607—629.
- [4] Kawasaki Y. // *J. Phys. Soc. Jap.* 1974. V. 36. N 1. P. 142—148.
- [5] Ikeda S. // *J. Phys. Soc. Jap.* 1969. V. 27. N 6. P. 1564—1578.
- [6] Mugrabi H. // *Acta Met.* 1983. V. 31. N 9. P. 1367—1379.
- [7] Prinz F., Argon A. S. // *Phys. St. Sol. (a)*. 1980. V. 57. N 2. P. 741—753.
- [8] Fujita H., Tabata T. // *Acta Met.* 1973. V. 21. N 4. P. 355—365.
- [9] Fujita H. J. // *Phys. Soc. Jap.* 1967. V. 23. N 6. P. 1349—1361.
- [10] Bassim M. N., Kuhlman-Wilsdorf D. // *Phys. St. Sol. (a)*. 1973. V. 17. N 2. P. 379—393.
- [11] Holt D. L. // *J. Appl. Phys.* 1970. V. 41. N 1. P. 3197—3208.
- [12] Орлов А. Н. // ФММ. 1965. Т. 20. № 1. С. 12—20.
- [13] Владимиров В. И., Кусов А. А. // ФММ. 1976. Т. 41. № 5. С. 951—959.
- [14] Walgraef D., Aifantis E. C. // *J. Appl. Phys.* 1985. V. 58. N 2. P. 688—691.
- [15] Хакен Г. Синергетика. М., 1980. 406 с.
- [16] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 7. С. 2067—2072.
- [17] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 10. С. 3174—3177.
- [18] Смирнов Б. И. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Л., 1981. 232 с.
- [19] Попов Л. Е., Кобытев В. С., Ковалевская Т. А. Пластическая деформация сплавов. М., 1984. 182 с.
- [20] Takeuchi T. // *J. Phys. Soc. Jap.* 1970. V. 28. N 4. P. 955—964.
- [21] Mugrabi H. // *Mater. Sci. Eng.* 1987. V. 85. N 1. P. 15—31.
- [22] Hansen N. // *Acta Met.* 1977. V. 25. N 8. P. 863—869.
- [23] Бакач Г. П., Корниенко Л. А., Дударев Е. Ф. // *Изв. вузов, физика*. 1986. Т. 29. № 11. С. 113—116.
- [24] Валиев В. Ю., Бенгус В. З., Валиев Р. З., Кайбышев О. А. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 6. С. 1712—1718.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
15 декабря 1987 г.
З окончательной редакции
10 августа 1988 г.