

Статистическая теория движения дислокаций при наличии спонтанных процессов блокирования–деблокирования

© Б.В. Петухов

Институт кристаллографии Российской академии наук,
117333 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 8 сентября 2000 г.)

Объяснение наблюдаемого в экспериментах *in situ* скачкообразного характера движения дислокаций требует выхода за рамки простейших моделей. Учет дополнительных степеней свободы, управляющих переключением между "скользящими" и "сидячими" состояниями дислокаций, позволяет дать обобщенное описание дислокационной динамики. Полученное в настоящей работе решение соответствующей статистической модели описывает закономерности скачкообразного движения дислокаций и связанные с ними особенности пластичности материалов.

Электронно-микроскопические наблюдения поведения дислокаций под нагрузкой в ряде материалов обнаружили скачкообразный характер их движения. Интересный пример такого рода — скачкообразное движение дислокаций в призматических плоскостях в *Be* и *Ti* [1], когда после пробега нескольких периодов решетки дислокация самопроизвольно останавливается на некоторое время (блокируется), а затем процесс многократно повторяется. На уровне макроскопической пластической деформации это сопровождается наличием плато на температурной зависимости деформирующего напряжения и аномального пика активационного объема. Качественная интерпретация явления основана на предположении о существовании у дислокационного ядра различных состояний — подвижного и неподвижного — с возможностью переходов между ними (*locking–unlocking transistios*) [1]. Механизм перехода в неподвижное "сидячее" состояние может представлять собой перестройку в энергетически более выгодную конфигурацию ядра с расщеплением в поперечной плоскости; выход в подвижное "скользящее" состояние по предположению осуществляется поперечным скольжением. При этом наличие аномалий характеристик пластичности объяснялось в [1] переходом от движения дислокаций, контролируемого поперечным скольжением, к движению по механизму Пайерлса–Набарро (описание этих элементарных дислокационных механизмов см., например, в [2]).

В настоящей работе изучена более общая ситуация, поскольку конкретные механизмы движения дислокаций не закладываются в модель и могут в принципе иметь другую природу. Кроме того, и это главное, сам факт смены механизма изучен не с позиций качественной картины, постулирующей различное поведение по разные стороны от перехода, а с использованием обобщенного единого описания при помощи функций распределения. Это позволило дать более корректную картину переходного поведения. Помимо расчета модифицированной подвижности индивидуальных дислокаций дано описание ряда специфических особенностей макроскопической пластической деформации материалов, обусловленных

наличием процессов спонтанных переходов дислокации в заблокированные состояния и выхода из них.

1. Кинетика скользящих и сидячих состояний дислокаций

Нас будет интересовать в первую очередь влияние дополнительных степеней свободы, а роль обычных скользящих состояний ядра дислокации будет описываться наиболее простым образом. Рассмотрим перемещение дислокации в плоскости скольжения между различными устойчивыми положениями, нумеруемыми индексом i : $i = 1, 2, 3 \dots$. Пусть вероятность перехода между соседними скользящими состояниями в единицу времени есть J_0 . Направление переходов (в сторону увеличения i) диктуется внешней нагрузкой, обратными переходами будем пренебрегать. Наличие дополнительных степеней свободы будем учитывать существованием в каждом положении дислокации i некоторого дополнительного "сидячего" состояния, с которым возможны взаимные переходы: с частотой J_- из скользящего в сидячее и с частотой J_+ из сидячего в скользящее. В отличие от случая скользящих состояний переходы между различными сидячими состояниями по предположению не происходят (схема на рис. 1).

Введем числа заполнения скользящих состояний f_i и сидячих состояний φ_i . Кинетика изменения чисел

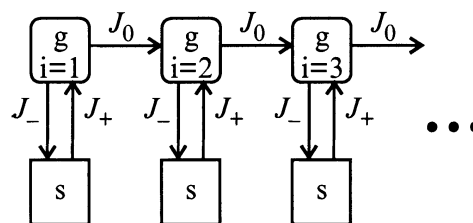


Рис. 1. Схема переходов между "скользящими" (g) и "сидячими" (s) состояниями дислокаций.

заполнения состояний может быть описана уравнениями

$$\frac{df_i}{dt} = J_0(f_{i-1} - f_i) - J_-f_i + J_+\varphi_i, \quad (1)$$

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = J_-f_i - J_+\varphi_i. \quad (2)$$

При континуальном описании будем пользоваться непрерывной координатой $x = ia$ (a — период решетки) и функциями распределения $f(x, t)$ и $\varphi(x, t)$, дающими плотность вероятности встретить дислокацию в интервале между x и $x + dx$. Заменяя в (1) конечную разность $f_{i+1} - f_i$ производной adf/dx , приходим вместо (1) и (2) к уравнениям

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -v\frac{\partial f}{\partial x} - J_-f + J_+\varphi, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = J_-f - J_+\varphi. \quad (4)$$

Здесь $v = aJ_0$. Отметим, что в отсутствие дополнительных состояний (3) примет вид $\frac{\partial f}{\partial t} = -v\frac{\partial f}{\partial x}$, решение которого при начальном условии $f(x, 0) = \delta(x)$ есть $f(x, t) = \delta(x - vt)$. Таким образом, в этом случае имеет место простая трансляция системы, а v представляет собой скорость скольжения. Разумеется в реальной ситуации всегда имеются причины для уширения δ -функции, но эта сторона дела сейчас не важна и будет учитываться в дальнейшем лишь в иллюстрациях без конкретизации соответствующего механизма. Включение дополнительных состояний создает возможность "блуждания" системы по различным состояниям с задержками в них, в результате чего характер эволюции значительно видоизменяется. Изучим его, пользуясь уравнениями (3) и (4), благо система еще остается достаточно простой для аналитического исследования.

Для получения решения системы уравнений (3) и (4) произведем в них преобразование Лапласа по времени

$$F(x, s) = \int_0^{\infty} \exp(-st)f(x, t)dt,$$

$$\Phi(x, s) = \int_0^{\infty} \exp(-st)\varphi(x, t)dt.$$

Тогда (4) приводится к соотношению

$$\Phi(x, s) = (J_-/(s + J_+))F(x, s), \quad (5)$$

позволяющему исключить φ из системы уравнений и получить из (3) замкнутое уравнение

$$v\frac{dF}{dx} + s\left(1 + \frac{J_-}{s + J_+}\right)F = 0. \quad (6)$$

Решением уравнения (6), удовлетворяющим условию нормировки $\int_0^{\infty} [f(x, t) + \varphi(x, t)]dx = 1$, является

$$F(x, s) = (1/v)\exp[-(sx/v)(1 + J_-/(s + J_+))]. \quad (7)$$

Произведем обратное преобразование Лапласа $F(x, s)$

$$f(x, s) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{1}{v} \exp\left(-\frac{sx}{v}\left(1 + \frac{J_-}{s + J_+}\right) + st\right) ds.$$

Сдвинем переменную интегрирования $s = s' - J_+$ и перегруппируем подынтегральное выражение

$$f(x, t) = \frac{\exp\left(-\frac{x}{v}(J_- - J_+) - J_+t\right)}{2\pi i} \times \int_{c'-i\infty}^{c'+i\infty} e^{s't'} \left\{ \left[e^{\frac{x(J_- - J_+)}{vs'}} - 1 \right] + 1 \right\} ds'. \quad (8)$$

Здесь $t' = t - x/v$, $c' = c + J_+$.

Обратное преобразование Лапласа от 1 дает $\delta(t')$, а для вычисления преобразования от первого слагаемого под знаком интеграла применим формулу 5.5.31 [3]

$$\exp(\alpha/s) - 1 \propto (\alpha/t)^{1/2} I_1(2(\alpha t)^{1/2}),$$

где $I_1(z)$ — модифицированная функция Бесселя первого порядка [4]. Таким образом, получаем в результате функцию распределения, состоящую из двух вкладов: $f(x, t) = f_1(x, t) + f_2(x, t)$, где

$$f_1(x, t) = \exp(-x(J_- - J_+)/v - J_+t)\delta(x - vt), \quad (9)$$

$$f_2(x, t) = \exp(-x(J_- - J_+)/v - J_+t) \times (xJ_-J_+ / [v^3(t - x/v)])^{1/2} \times I_1(2[xJ_-J_+(t - x/v)/v]^{1/2}). \quad (10)$$

δ -функциональный пик описывает перемещение с невозмущенной скоростью, как это имеет место при отсутствии дополнительных состояний. Однако при их наличии этот пик затухает по мере увеличения пробега. Его содержимое перекачивается во второй пик, вид которого устанавливается в результате перераспределения между скользящими и сидячими состояниями. Экспоненциальный множитель в (9) в силу диктуемого δ -функцией соотношения $x = vt$ равен $\exp(-xJ_-/v)$, т.е. представляет собой вероятность "не свалиться" на длине x в сидячее или, говоря иначе, иметь длину прыжка не меньше x . Плотность вероятности иметь длину прыжка в интервале от x до $x + dx$ есть производная $-d/dx(\exp(-xJ_-/v)) = (J_-/v)\exp(-xJ_-/v)$. Средняя длина прыжка x_1 равна таким образом,

$$x_1 = \frac{J_-}{v} \int_0^{\infty} x \exp\left(-\frac{xJ_-}{v}\right) dx = \frac{v}{J_-}. \quad (11)$$

Функция распределения по сидячим состояниям $\varphi(x, t)$ с помощью (4) может быть выражена через $f(x, t)$. В итоге получаем

$$\varphi(x, t) = (J_-/v) \exp(-x(J_- - J_+)/v - J_+t) \times I_0(2[xJ_-J_+(t - x/v)/v]^{1/2}). \quad (12)$$

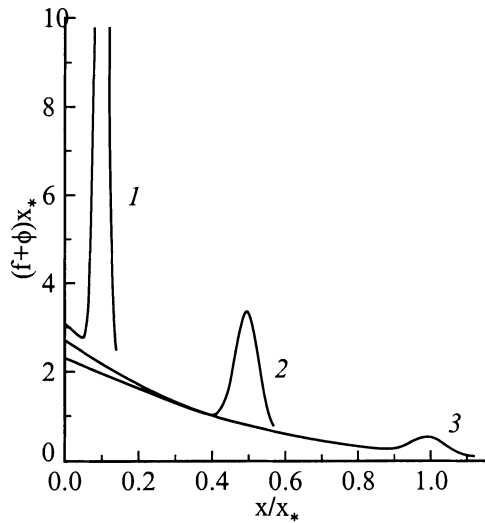


Рис. 2. Эволюция пространственного распределения дислокаций $f(x, t) + \varphi(x, t)$, стартующих при $t = 0$ из точки $x = 0, x_* = v/(J_+J_-)^{1/2}$. 1 — соответствует моменту времени $t = 0.1/(J_+J_-)^{1/2}$, 2 — $0.5/(J_+J_-)^{1/2}$, 3 — $1/(J_+J_-)^{1/2}$.

Здесь $I_0(z)$ — модифицированная функция Бесселя порядка 0 [14].

При относительно небольших временах, малых по сравнению с временем выхода из сидячего состояния $1/J_+$, суммарное распределение $f_2(x, t) + \varphi(x, t)$ максимально вблизи $x = 0$ и убывает с ростом x (рис. 2). Однако при $t \gg 1/J_+$, когда происходит много актов блокировки–деблокировки и устанавливается некоторая средняя скорость движения, распределение ”отрывается” от $x = 0$ и положение максимума перемещается со временем в сторону увеличения x .

Найдем, как изменяется со временем средняя длина пробега

$$\langle x(t) \rangle = \int_0^\infty [f(x, t) + \varphi(x, t)] x dx.$$

По известным функциям распределения (9), (10), (12) получаем

$$\langle x(t) \rangle = (v/(J_+J_-)^{1/2}) \chi(t(J_+J_-)^{1/2}), \quad (13)$$

где

$$\chi(z) = \frac{J_+/J_-}{1 + J_+/J_-} z + \frac{(J_+/J_-)^{1/2}}{(1 + J_+/J_-)^2} \times \left[1 - \exp \left\{ - \frac{(1 + J_+/J_-)}{(J_+/J_-)^{1/2}} z \right\} \right].$$

Таким образом, движение дислокаций в рассматриваемом случае является неоднородным по времени. Как следует из (13), при малых t зависимость длины пробега от времени имеет невозмущенный вид $\langle x(t) \rangle \approx vt$. По истечении достаточно большого времени по сравнению

с длительностью отдельного прыжка, $t \gg 1/(J_- + J_+)$, длина пробега в основном определяется перенормированной усредненной скоростью движения

$$\langle x(t) \rangle \approx vtJ_+/(J_- + J_+). \quad (14)$$

При большой разнице в вероятностях попадания в сидячие состояния и выхода из них, $J_+ \ll J_-$, уменьшение скорости движения дислокаций может быть значительным. Формула (13) позволяет также описывать переходное поведение, когда при изменении параметров, например температуры, имеет место смена контролирующего механизма от простого скольжения к скачкообразному движению. Это приводит к модификации закономерностей макроскопического пластического течения материала.

2. Температурная зависимость деформирующего напряжения и активационного объема

Применим полученные результаты к описанию макроскопической пластической деформации. Для движения дислокаций со средней скоростью v при плотности ρ скорость пластического течения $\dot{\epsilon}$ дается соотношением Орована $\dot{\epsilon} = \rho b v(\sigma, T)$, где b — величина вектора Бюргера. При деформации с постоянной скоростью и при известной зависимости скорости движения от напряжения σ и температуры T это соотношение может быть использовано для определения температурной зависимости деформирующего напряжения $\sigma(T)$.

В случае термоактивируемого движения зависимость v от σ и T определяется в основном аррениусовским фактором $v = v_0 \exp(-E(\sigma, T))$, где $E(\sigma, T)$ — соответствующая энергия активации, а v_0 — малосущественный предэкспоненциальный множитель. Для иллюстративного описания движения дислокаций будет использоваться модельная зависимость энергии активации от напряжения [5]

$$E(\sigma) = E_0 [1 - (\sigma/\sigma_*)^q]^p. \quad (15)$$

Получающаяся отсюда температурная зависимость деформирующего напряжения при отсутствии блокировок изображена на рис. 3 штриховой линией ($\ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon}) = 25$, $\dot{\epsilon}_0 = \rho b v_0$, $p = 2$, $q = 0.5$).

В интересующем нас случае движения, сопровождающегося спонтанными переходами в сидячие состояния и обратно, заменим с учетом временной неоднородности процесса скорость движения v эффективной величиной $v_{ef} = l_{fp}/t_{fp}$. Здесь l_{fp} — длина свободного пробега дислокации до ее выбытия из игры (выхода на поверхность, аннигиляции с другими дислокациями и т.п.), t_{fp} — соответствующее время пробега. При заданной длине пробега l_{fp} время пробега может быть найдено из равенства $\langle (t_{fp}) \rangle = l_{fp}$ с использованием кинетического закона (13). Это дает возможность получить модифицированную температурную зависимость деформирующего напряжения.

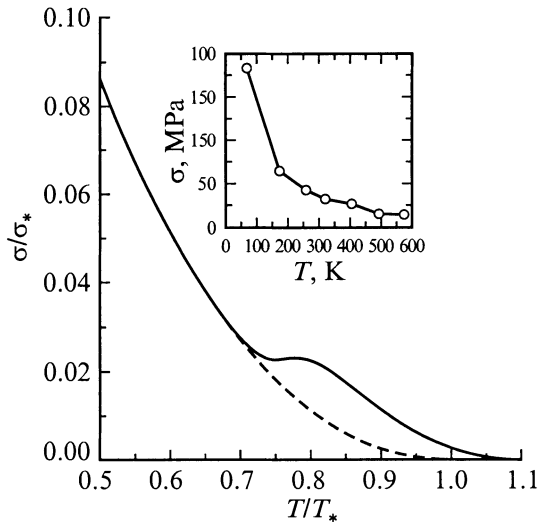


Рис. 3. Рассчитанная температурная зависимость деформирующего напряжения ($T_* = E_0 / (k \ln(\dot{\epsilon}_0 / \dot{\epsilon}))$), σ_* и E_0 определены формулой (15)). На врезке показаны экспериментальные данные [1] для призматического скольжения в Ti.

Для иллюстративного расчета будем предполагать термоактивируемый характер переходов между скользящими и сидячими состояниями $J_{+,-} = J_0 \exp(-E_{+,-}/kT)$ с постоянными энергиями активации E_+ и E_- . Выражая из соотношения Орована время пробега $t_{fp} = \rho b l_{fp} / \dot{\epsilon}$ и подставляя его в (13), получаем модифицированное уравнение для определения температурной и скоростной зависимостей деформирующего напряжения

$$E(\sigma) = kT \ln(\dot{\epsilon}_0 / \dot{\epsilon}) + kT \ln[\chi(z)/z]. \quad (16)$$

Здесь

$$z = t_{fp}(J_- J_+)^{1/2} = (l_{fp} J_0 / v_0) \times (\dot{\epsilon}_0 / \dot{\epsilon}) \exp(-(E_+ + E_-)/(2kT)).$$

При большой величине барьера E_- для попадания в сидячее состояние z мало, $\chi(z)/z \approx 1$, второе слагаемое в правой части (16) исчезает, и это уравнение сводится к обычному соотношению для определения $\sigma(T)$ при простом скольжении. Если же барьер не слишком высок и термическая активация процесса блокировок происходит с заметной частотой, величина деформирующего напряжения изменяется. На рис. 3 показана получающаяся из приведенных соотношений модифицированная температурная зависимость $\sigma(T)$ для набора параметров $E_- = 1.1E_0$, $E_+ = E_0$, $l_{fp} J_0 / v_0 = 10^4$.

В общем случае эффект "западания" дислокаций в сидячие положения приводит, естественно, к повышению деформирующего напряжения. В силу резкого экспоненциального характера температурных зависимостей термоактивационной кинетики переход к модифицированной величине деформирующего напряжения происходит в узкой окрестности некоторой температуры перехода

T_{tr} , выше которой напряжение медленнее убывает с увеличением температуры и наклон $\sigma(T)$ уменьшается (образуется подобие плато). На врезке к рис. 3 показано для сравнения поведение с температурой величины деформирующего напряжения при призматическом скольжении в Ti по данным [1].

На рис. 4 показана температурная зависимость величины активационного объема γ , рассчитанного по формуле $\gamma = kT / (d\sigma / d \ln \dot{\epsilon})$. Штриховая линия изображает активационный объем при простом скольжении в отсутствие процессов блокировки дислокаций. Как видно из рисунка, наличие процессов блокировки вызывает пик активационного объема при приближении к T_{tr} . На врезке показана температурная зависимость активационного объема, экспериментально измеренного для призматического скольжения в Ti [1]. Зависимость имеет аномальный пик. Налицо качественное согласие рассчитанного в рамках предлагаемой модели и экспериментально наблюдаемого поведения.

Развитая теория позволяет удовлетворительно описать переходное поведение от обычного скольжения к движению со спонтанными блокировками-деблокировками дислокаций. Приведенные иллюстрации показывают, что этот переход дает возможный механизм наблюдаемых при механических испытаниях аномалий температурной зависимости характеристик пластической деформации материалов.

Отметим, что аналогичные аномалии пластичности наблюдались также в α -Fe [6,7], Mo [8], Nb [9], Sn [10,11] и других материалах. Однако скачкообразность движения дислокаций не была установлена, поскольку *in situ* исследования не проводились. Поэтому наличие аномалий объяснялось, исходя из обычного механизма скольжения, предположением о сложном двугорбом рельефе барье-

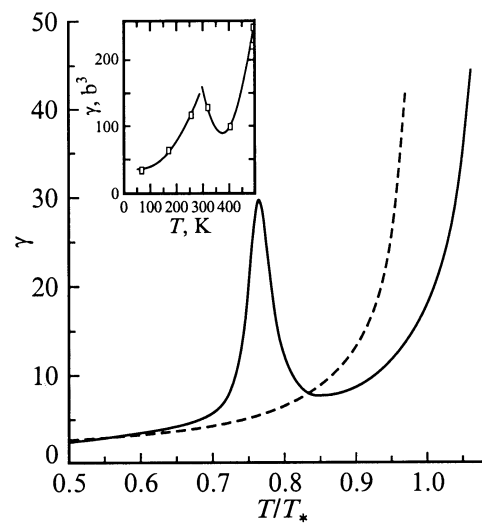


Рис. 4. Рассчитанная температурная зависимость активационного объема (нормированного на E_0/σ_*). На врезке показаны экспериментальные данные [1] для призматического скольжения в Ti.

ра Пайерлса–Набарро [12,13] или другими гипотезами. Микроскопические исследования движения дислокаций в этих материалах были бы полезными для более надежной идентификации механизма, ответственного за аномалии пластичности.

Список литературы

- [1] S. Farenc, D. Caillard, A. Couret. In: Solid State Phenomena. Scitec Publications, Switzerland (1994). Vol. 35–36. P. 429.
- [2] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 598 с.
- [3] Г. Бейтмен, А. Эрдейн. Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. Наука, М. (1969). 344 с.
- [4] М. Абрамовиц, И. Стиган. Справочник по специальным функциям. Наука, М. (1979). 830 с.
- [5] U.F. Kocks, A.S. Argon, M.F. Ashby. In: Thermodynamics and Kinetics of Slip / Ed. by B.Chalmers, J.W. Christian, T.V. Massalski. Prog. in Mater. Sci. Vol. 19. Pergamon Press, Oxford (1975).
- [6] D.I. Quesnel, A. Sato, M. Meshii. Mater. Sci. Eng. **18**, 1, 199 (1975).
- [7] Y. Aono, K. Kitajima, E. Kuramoto. Scr. Metallurg. **15**, 3, 275 (1981).
- [8] H.-J. Kaufman, A. Luft, D. Schulze. Dislocations in Solids / Ed. by H. Suzuki, T. Ninomiya, K. Sumino, S. Takeuchi. University of Tokyo Press (1985). P. 455.
- [9] F. Ackerman, H. Mughrabi, A. Seeger. Acta metall. **31**, 9, 1353 (1983).
- [10] Г.И. Кириченко, В.Д. Нацик, В.П. Солдатов. ФММ **65**, 2, 386 (1987).
- [11] А.Н. Дулин, Г.И. Кириченко, В.Д. Нацик, В.П. Солдатов. ФНТ **24**, 4, 595 (1998).
- [12] S. Takeuchi, E. Kuramoto. J. Phys. Soc. Japan. **38**, 3, 480 (1975).
- [13] T. Suzuki, H. Koizumi, H.O.K. Kircher. Acta metall mater. **43**, 6, 2177 (1995).