

01;05

## Влияние атомов примеси на процесс размножения краевых дислокаций

© Н.М. Власов, В.А. Зазноба

(Поступило в Редакцию 3 марта 2000 г.)

Изучен процесс размножения краевых дислокаций при наличии примесных атмосфер. Они закрепляют дислокационную линию, и для включения источника размножения требуется дополнительное напряжение. Получены соотношения для диффузионного перераспределения атомов примеси вдоль дислокационного сегмента из-за неоднородного значения химического потенциала. Результаты теоретического анализа привлекаются для качественного объяснения начальной стадии ползучести при умеренных температурах.

При пластической деформации металлов плотность краевых дислокаций увеличивается, как правило, на несколько порядков. Такое увеличение обусловлено процессом размножения дислокаций в рамках модели источников Франка–Рида или Бардина–Херринга [1]. Суть механизма размножения краевых дислокаций с помощью источников Франка–Рида достаточно наглядна. Под действием сдвигового напряжения отрезок дислокационной линии выгибается между стабильными точками закрепления. При достижении критического радиуса дислокационный сегмент теряет устойчивость и образуется замкнутая дислокационная петля. Оставшийся отрезок дислокации повторяет весь цикл образования дислокационной петли. Действие источника Бардина–Херринга идентично, однако имеется одно существенное отличие: движущей силой процесса размножения дислокаций является их переползание за счет неравновесной концентрации вакансий или межузельных атомов.

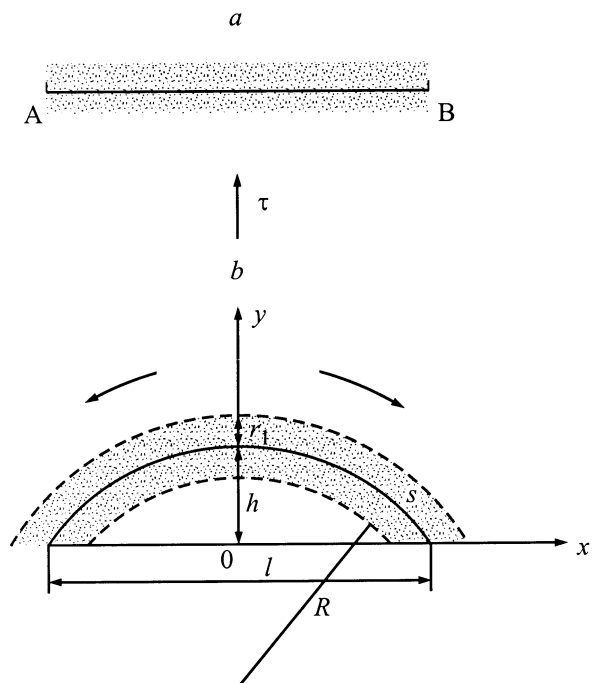
Процесс размножения краевых дислокаций обычно рассматривается без учета соответствующего влияния примесных атомов. Между тем примесные атмосферы в окрестности краевых дислокаций повышают критическое напряжение сдвига для образования дислокационной петли. Работа источника размножения краевых дислокаций начинается при более высоком значении приложенного напряжения. После изгиба дислокационного отрезка вместе с примесной атмосферой начинается диффузионное перераспределение атомов примеси уже вдоль дислокационного сегмента, обусловленное градиентом химического потенциала. В результате этого участки краевых дислокаций освобождаются от примесных атомов и сдвиговое напряжение для включения источника размножения дислокаций уменьшается. При этом миграция атомов примеси вдоль дислокационного сегмента осуществляется механизмом трубчатой диффузии, энергия активации которой меньше таковой для объема диффузии. Атомы примеси по местам облегченной диффузии уходят на границы зерен, а также частично переходят в твердый раствор.

Цель настоящей работы — всесторонний анализ влияния атомов примеси на процесс размножения краевых дислокаций. В принятой модели рассматривается только размерный эффект в энергии связи дислокация–примесь. Результаты теоретического анализа привлекаются для

качественного объяснения начальной стадии ползучести при умеренных температурах.

Пусть отрезок дислокационной линии длиной  $l$  закреплен в точках  $A$  и  $B$  линиями пересечения дислокаций (см. рисунок,  $a$ ). В окрестности дислокационного отрезка сформирована равновесная примесная атмосфера. Начальный изгиб дислокационного отрезка под действием приложенного сдвигового напряжения лимитирован объемной диффузией атомов примеси. Для включения источника размножения дислокаций в беспримесном материале необходимо меньшее сдвиговое напряжение. Примесные атмосферы закрепляют дислокационную линию и для изгиба отрезка дислокации до критического значения требуется приложить дополнительное напряжение.

Закрепление краевой дислокации атомами примеси в приближении разбавленных и концентрированных твер-



Отрезок дислокации ( $a$ ) и дислокационный сегмент ( $b$ ) с примесными атмосферами.

дых растворов достаточно подробно описано в работе [2]. Получены соотношения для силы отрыва краевой дислокации от примесной атмосферы в этих приближениях. Оценки показывают, что упрочнение за счет примесной атмосферы по порядку величины сравнимо с приложенным сдвиговым напряжением. Действительно, для системы железо–углерод (Fe–C) ( $\delta v = 3 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3$ ,  $\nu = 0.28$ ,  $c_0 = 10^{26} \text{ м}^{-3}$ )  $F/L \simeq \beta \cdot c_0 = 0.6 \cdot 10^{-4} \mu b$ . Здесь  $\beta = \mu b(1+\nu)[3\pi(1-\nu)]^{-1} \delta v$ ,  $\mu$  — модуль сдвига,  $b$  — модуль вектора Бюргера дислокации,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $\delta v$  — изменение объема кристалла при введении атома примеси,  $c_0$  — средняя концентрации атомов примеси,  $F/L$  — сила отрыва дислокации от примесной атмосферы (на единицу длины). Если краевая дислокация находится под действием сдвигового напряжения  $\tau_0$ , то на единицу длины действует сила  $F_0/L = \tau_0 b$ , которая при  $\tau_0 = 10^{-4} \mu$  равна  $10^{-4} \mu b$ . С учетом вклада примесной атмосферы получим

$$\frac{F_{\text{tot}}}{L} = \frac{F_0}{L} + \frac{F}{L} = 1.6 \cdot 10^{-4} \mu b.$$

Это означает, что источник размножения краевых дислокаций испускает дислокационные петли в материалах с примесями при более высоком значении приложенного напряжения.

Если приложенная нагрузка недостаточна для освобождения дислокационного отрезка от атомов примеси, то происходит его выгибание вместе с примесной атмосферой. Энергия активации этого процесса соответствует объемной диффузии примесных атомов. После незначительного прогиба осуществляется диффузионное перераспределение атомов примеси уже вдоль выпуклого отрезка дислокации (рис. 1, *b*) с меньшей энергией активации. Движущей силой такого процесса является градиент химического потенциала атома примеси вдоль дуги  $s$  дислокационного сегмента. При этом кривизна сегмента  $K$  меняется только по направлению, оставаясь постоянной по абсолютной величине. Это обуславливает диффузионное перемещение атомов примеси вдоль отрезка дислокационного сегмента (указано стрелками на рисунке).

Отрезок дислокационной линии под действием приложенного напряжения изгибается и приобретает кривизну  $K = 1/R \simeq \tau_0/(\mu b)$ . Для  $\tau_0/\mu = 10^{-4}$ ,  $b = 2.48 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ,  $l = 10^{-6} \text{ м}$  получим  $R = 2.48 \cdot 10^{10-6} \text{ м}$  и  $h = 0.05 \cdot 10^{-6} \text{ м}$  ( $h$  — высота дислокационного сегмента).

Кривизна дислокационного сегмента вызывает диффузионное перераспределение атомов примеси вдоль линии дислокации. Атомы примеси "скатываются" с горки дислокационного сегмента за счет диффузии вдоль дислокационной трубки. При этом ускоренная диффузия протекает в узкой области вблизи ядра дислокации, занимая область с характерным размером в несколько векторов Бюргера. Этой области соответствует наиболее высокая концентрация атомов примеси в окрестности дислокационной линии. Поэтому для количественного описания

этого процесса примем следующую модель. Примесная атмосфера занимает цилиндрическую область радиуса  $r_1 > r_0$  ( $r_0$  — радиус ядра дислокации), где атомы примеси наиболее сильно закрепляют дислокацию. Величину  $r_1$  можно определить из условия

$$\frac{\beta \sin \theta}{r_1} = kT, \quad r_1 = \frac{\beta \sin \theta}{kT},$$

где  $k$  и  $T$  имеют обычный смысл (постоянная Больцмана и абсолютная температура),  $\theta$  — угол в полярных координатах.

Для  $kT = 10^{-20} \text{ Дж}$ ,  $\sin \theta = 1$  и  $\beta = 10^{-29} \text{ Дж} \cdot \text{м}$  получим  $r_1 = 10^{-9} \text{ м}$ . Физически это условие означает, что при  $r > r_1$  атомы примеси практически не чувствуют дислокацию из-за превалирующего влияния энергии теплового движения. При более строгом описании необходимо потенциальное поле дислокации заменить прямоугольным потенциалом с условием интегрального равенства атомов примеси в реальной и модельной потенциальных ямах. Математически это условие записывается в виде (число избыточных атомов примеси на единицу длины линии дислокации)

$$\begin{aligned} \frac{N}{L} &= c_0 \int_0^{2\pi} \int_{r_0}^R \left[ \exp\left(-\frac{\beta \sin \theta}{rkT}\right) - 1 \right] r dr d\theta \\ &= c_0 \int_0^{\pi} \int_{r_0}^{r_1} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{U_1}{kT}\right) \right] r dr d\theta \\ &+ c_0 \int_{\pi}^{2\pi} \int_{r_0}^{r_1} \left[ \exp\left(\frac{U_1}{kT}\right) - 1 \right] r dr d\theta \\ &\simeq \frac{\pi c_0 \beta^2}{2(kT)^2} \text{sh}\left(\frac{U_1}{kT}\right). \end{aligned}$$

Здесь использовано, что  $\overline{\sin^2 \theta} = 0.5$  и  $r_1^2 \gg r_0^2$ . Для определения значения потенциала модельной прямоугольной ямы  $U_1$  ограничимся первым четным членом разложения экспоненциальной функции (именно четные члены разложения определяют накопление атомов примеси в окрестности линии дислокации) и получим

$$\begin{aligned} \frac{N}{L} &= c_0 \int_0^{2\pi} \int_{r_0}^R \left[ \exp\left(-\frac{\beta \sin \theta}{rkT}\right) - 1 \right] r dr d\theta \\ &= \frac{\pi c_0 \beta^2}{2(kT)^2} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right), \end{aligned}$$

где  $2R$  — среднее расстояние между линиями дислокаций.

Из условия  $\text{sh}[U_1/(kT)] = \ln(R/r_0)$  находим значение  $U_1$ . Так, для  $R = 10^4 b$ ,  $r_0 = 2b$ ,  $\ln(R/r_0) = 8.5$  получим  $U_1 \simeq 2.84kT$ .

Теперь вся примесная атмосфера сосредоточена в цилиндре с характерным размером  $r_1$  и постоянным потенциалом  $U_1$ , т.е. энергия связи атома примеси с дислокацией постоянна внутри области  $r_0 \leq r < r_1$ . Это дает возможность моделировать уход атомов примеси за счет диффузии вдоль дислокационного сегмента и тем самым определить уменьшение напряжения закрепления дислокации примесной атмосферой. Как только достаточное количество примесей освободит дислокационный сегмент, приложенное напряжение вытеснит дислокацию из освободившейся примесной атмосферы. Время освобождения дислокационного сегмента от примесной атмосферы следует рассматривать как инкубационный период подготовки источника к испусканию петли дислокации.

Трубочная диффузия атомов примеси обусловлена неоднородным распределением химического потенциала атомов примеси вдоль линии дислокации. Следуя [3], запишем химический потенциал атома примеси на поверхности дислокационной трубки в виде

$$\mu_s = \mu_0 = \omega \gamma K,$$

где  $\mu_0$  — химический потенциал атома примеси на плоской поверхности;  $\omega$  — объем атома примеси;  $\gamma$  — величина поверхностного натяжения на границе примесной атмосферы в окрестности линии дислокации;  $K$  — кривизна дислокационного сегмента, которая следующим образом связана с координатами (см. рисунок,  $b$ ):

$$K = \frac{y''}{[1 + (y')^2]^{3/2}}.$$

Диффузионный поток атомов примеси вдоль дислокационной трубки пропорционален градиенту химического потенциала

$$I_s = \frac{D_s n}{kT} \frac{\partial \mu_s}{\partial s} = - \frac{D_s \gamma \omega n}{kT} \frac{\partial K}{\partial s},$$

где  $D_s$  — коэффициент трубочной диффузии вдоль линии дислокации,  $s$  — длина дуги вдоль профиля искажения отрезка дислокации,  $n$  — число атомов примеси на единице площади поверхности примесной атмосферы:

$$\frac{\partial K}{\partial s} = \frac{1}{\sqrt{1 + (y')^2}} \frac{\partial K}{\partial x} = \frac{\partial K}{\partial x},$$

так как

$$(y')^2 = \frac{x^2}{R^2 - x^2} \ll 1.$$

Это следует из  $0 \leq x \leq l/2$  и  $l \ll R$ , поэтому  $K = y''$ . Теперь скорость ухода атомов примеси за счет трубочной диффузии находится из решения уравнения

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \omega \operatorname{div} (I_s) = - \frac{D_s \gamma \omega^2 n}{kT} \frac{\partial^4 y}{\partial x^4}.$$

Дислокационный сегмент "одет" примесной атмосферой радиуса  $r_1$  с постоянной концентрацией примесей в этой области. Атомы примеси уходят с изогнутой

поверхности сегмента, и по мере их ухода уменьшается радиус примесной атмосферы. Это описывается как скорость изменения координаты  $y$  во времени. При этом предполагается, что внутри "примесной" трубки нет перераспределения атомов примеси из-за постоянного значения принятого модельного потенциала  $U_1$ .

Для математического упрощения задачи профиль дислокационного сегмента аппроксимируем функцией  $y = (h + r_1) \cos(\pi x/l)$ , где  $h$  — высота сегмента. Такая аппроксимация изменит структуру решения уравнения, однако качественно картина ухода примесей вдоль сегмента дислокации нарушится мало. К тому же следует учитывать оценочный характер параметров задачи, а также простоту и физическую прозрачность полученного ниже решения. Рассмотрим периодическое решение уравнения для  $|x/l| \leq 0.5$ . Записывая изменение профиля сегмента в виде  $y = h_1 \cos(\pi x/l)$ , для нахождения  $h_1(t)$  получим уравнение

$$\frac{\partial h_1}{\partial t} = - \frac{\pi^4 D_s \gamma \omega^2 n}{kT l^4} h_1(t), \quad h_1 = h + r_1 \text{ при } t = 0.$$

Отсюда легко получить временную зависимость изменения профиля поверхности примесной атмосферы

$$y = (h + r_1) \exp(-t/\tau) \cos(\pi x/l),$$

где  $\tau = kT l^4 / (\pi^4 D_s \gamma \omega^2 n)$ .

Время релаксации  $\tau$  характеризует уход примесных атомов из окружения дислокационного сегмента, т.е. определяет инкубационный период подготовки источника к испусканию дислокационной петли. Отметим, что характерный размер базы дислокационного источника  $l$  можно выразить через скалярную плотность дислокаций и для  $\tau$  получить выражение

$$\tau = \frac{kT}{\pi^4 D_s \gamma \omega^2 n \rho^2}.$$

Видно, что инкубационный период подготовки источника к испусканию дислокационной петли в материале с примесями обратно пропорционален квадрату плотности дислокаций. По мере увеличения последней база дислокационного источника уменьшается и отрезки дислокаций быстрее освобождаются от примесной атмосферы. Оценим величину  $\tau$  применительно к системе Fe-C ( $kT = 10^{-20}$  J,  $\gamma = 1$  N/m,  $\omega = 10^{-29}$  m<sup>3</sup>,  $n = 10^{20}$  m<sup>-2</sup>,  $D_s = 10^{-12}$  m<sup>2</sup>/s,  $\rho = 10^{12}$  m<sup>-2</sup>), что дает  $\tau = 10^4$  s. Далее определим время освобождения дислокационного сегмента от примесной атмосферы. Предполагается, что атомы примеси равномерно уходят на границы зерен со всего отрезка линии дислокации. Для  $h = 0.05 \cdot 10^{-6}$  m и  $r_1 = 10^{-9}$  m из условия  $h - 2r_1 = h \exp(-t/\tau)$  находим  $t \simeq 400$  s. Это означает, что при  $\tau = 10^4$  s за время  $t = 400$  s высота сегмента для центрального участка ( $\cos(\pi x/l) \simeq 1$ ) уменьшится на величину  $2r_1$ , т.е. на величину характерного размера примесной атмосферы.

Далее рассмотрим возможные проявления указанного эффекта. Итак, наше рассмотрение показывает, что

атомы примеси оказывают существенное влияние на процесс размножения краевых дислокаций. Это связано главным образом с появлением инкубационного периода в работе дислокационного источника. Этот период обусловлен диффузионным перераспределением атомов примеси вдоль линии дислокации. Энергия активации этого диффузионного процесса ниже по сравнению с объемной диффузией. Так, анализ экспериментальных данных по диффузии вдоль дислокаций для металлов с гранцентрированной кубической решеткой показывает, что энергия активации трубочной диффузии составляет 0.4–0.7 от объемной [4]. Поэтому начальная стадия ползучести или пластической деформации при умеренных температурах и низких напряжениях должна определяться перераспределением атомов примеси вдоль дислокационных сегментов [5]. И лишь после некоторого инкубационного периода происходит отрыв линии дислокации от оставшейся примесной атмосферы и включается источник размножения дислокаций.

## Список литературы

- [1] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 595 с.
- [2] Власов Н.М. // ФММ. 1983. Т. 56. № 3. С. 583–586.
- [3] Власов Н.М. // ФММ. 1984. Т. 58. № 5. С. 897–901.
- [4] Баллуффи Р. // Термически активированные процессы в кристаллах. Пер. с англ. М.: Мир, 1973. С. 42–74.
- [5] Бауэр Ч. // Актуальные вопросы теории дислокаций. Пер. с англ. М.: Мир, 1968. С. 98–114.