

07,01

## Динамическое взаимодействие краевых дислокаций с точечными дефектами и призматическими дислокационными петлями при высокоскоростной деформации кристаллов

© В.В. Малашенко

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина,  
Донецк, Украина

E-mail: malashenko@fti.dn.ua

(Поступила в Редакцию 1 апреля 2016 г.)

Проанализировано движение ансамбля краевых дислокаций при высокоскоростной деформации кристалла с высокой концентрацией призматических дислокационных петель и точечных дефектов. Показано, что при определенных условиях сила торможения дислокации призматическими петлями имеет характер сухого трения, а величина этой силы определяется соотношением концентрации петель и плотности подвижных дислокаций. Рост плотности подвижных дислокаций приводит к усилению их коллективного взаимодействия, в результате чего облегчается преодоление дислокациями призматических петель. Полная сила торможения дислокации является немонотонной функцией концентрации точечных дефектов, при определенных условиях имеющей минимум.

Интенсивное развитие современных технологий обеспечило возможность реализации процессов, основанных на высокоскоростной деформации кристаллических материалов. Это происходит, в частности, при использовании сварки взрывом, ударно-волновом воздействии [1–3], воздействии на кристаллы лазерными импульсами высокой мощности [4–6], использовании метода динамического канального углового прессования [7,8] и высокоскоростной обработке [9,10]. При этом скорость пластической деформации достигает значений  $10^3–10^7 \text{ s}^{-1}$  [2,7], а дислокации совершают надбарьерное скольжение и движутся со скоростями  $v \geq 10^{-2}c$ , где  $c$  — скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле [11]. Это так называемая динамическая область, в которой дислокация преодолевает встречающиеся на ее пути препятствия без помощи термических флуктуаций.

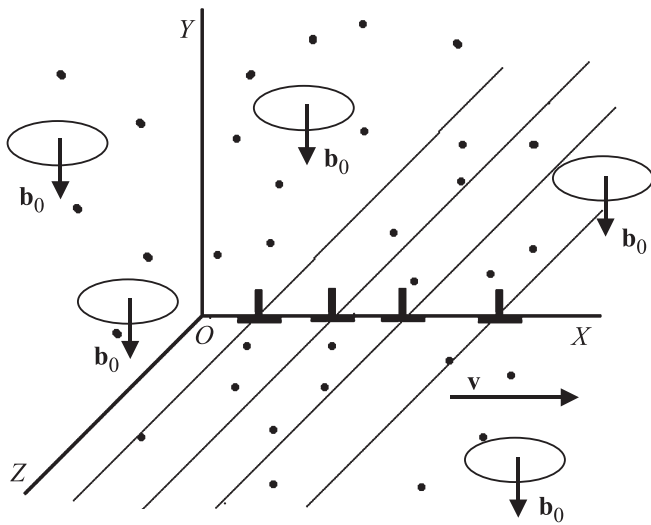
Существенное влияние на движение дислокаций, а следовательно, и на механические свойства кристаллов оказывает динамическое взаимодействие дислокаций с другими дефектами кристаллической структуры, в частности с точечными дефектами (примесями, вакансиями, междоузельными атомами) и дислокационными петлями, которые образуются при индентировании [12], ковке, штамповке, но особенно высока плотность этих петель при закалке [13,14] и радиационном облучении материалов [15].

Взаимодействие неподвижных дислокационных петель с неподвижными дислокациями детально изучено в монографии [16]. Авторы работы [17] использовали метод дискретной дислокационной динамики для анализа взаимодействия дислокационной сетки с призматической дислокационной петлей. В [18–20] методами молекулярной динамики исследовалось взаимодействие движущейся краевой дислокации с петлями в железе, меди и  $\alpha$ -цирконии. Вопрос об ориентационной зависимости

динамического взаимодействия краевых дислокаций с неподвижными петлями при надбарьерном скольжении детально проанализирован в работе [21]. Исследуемый в этой работе механизм диссипации заключался в необратимом переходе кинетической энергии поступательного движения дислокации в энергию ее изгибных колебаний в плоскости скольжения. Как следует из работ [21–23], динамика дислокаций при таком механизме диссипации зависит от вида спектра дислокационных колебаний, в частности от наличия щели в дислокационном спектре.

В [23] было показано, что наличие щели в спектре колебаний дислокации, движущейся в упругом поле круговых дислокационных петель, при определенных условиях приводит к возникновению силы сухого трения. Конкретный вид этой силы и особенности дислокационной динамики зависят при этом от того, какое взаимодействие вносит главный вклад в формирование спектральной щели. В работе [24] исследовалось движение краевой дислокации в упругом поле дислокационных петель и точечных дефектов, а доминирующим взаимодействием, порождающим щель, было коллективное взаимодействие дефектов с дислокацией. В [23] появление щели было результатом взаимодействия дислокации с поверхностью кристалла, а в [25] она возникала в результате магнитоупругого взаимодействия.

При ударно-волновом воздействии на кристалл плотность подвижных дислокаций достигает очень высоких значений, их коллективное взаимодействие значительно возрастает и оказывает доминирующее влияние на формирование спектра дислокационных колебаний и динамическое взаимодействие дислокаций с другими структурными дефектами решетки. В работах [26,27] исследовалось движение краевых дислокаций при ударных воздействиях на кристалл с высокой концентрацией



**Рис. 1.** Движение ансамбля краевых дислокаций в кристалле, содержащем точечные дефекты и призматические дислокационные петли.

точечных дефектов, однако дислокационные петли в этих кристаллах отсутствовали.

В настоящей работе анализируется скольжение краевых дислокаций при ударно-волновом воздействии на кристаллы, содержащие как точечные дефекты, так и призматические дислокационные петли, в условиях конкуренции коллективного взаимодействия дефектов и коллективного взаимодействия дислокаций.

Пусть бесконечные краевые дислокации совершают скольжение под действием постоянного внешнего напряжения  $\sigma_0$  в положительном направлении оси  $OX$  с постоянной скоростью  $v$  (рис. 1) в кристалле, содержащем хаотически распределенные точечные дефекты и дислокационные петли. Линии дислокаций параллельны оси  $OZ$ , их векторы Бюргерса  $\mathbf{b} = (b, 0, 0)$  одинаковы и параллельны оси  $OX$ . Плоскость скольжения дислокаций совпадает с плоскостью  $XOZ$ . Положение  $k$ -й дислокации определяется функцией

$$X_k(y = 0, z, t) = vt + w_k(y = 0, z, t). \quad (1)$$

Здесь  $w_k(y = 0, z, t)$  — случайная величина, описывающая изгибные колебания дислокации, возбужденные ее взаимодействием с хаотически распределенными дефектами. Среднее значение этой величины по длине дислокации и по хаотическому распределению дефектов равно нулю.

Плоскости дислокационных петель параллельны плоскости скольжения дислокаций, а их центры распределены в кристалле случайным образом. Рассмотрим случай, когда все дислокационные петли являются призматическими. Для простоты все петли будем считать одинаковыми, т.е. имеющими одинаковые радиусы, равные  $a$ , и одинаковые векторы Бюргерса  $\mathbf{b}_0 = (0, -b_0, 0)$ , параллельные оси  $OY$ .

Уравнение движения  $k$ -й дислокации может быть представлено в следующем виде:

$$m \left\{ \frac{\partial X^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \right\} = b [\sigma_0 + \sigma_{xy}^d + \sigma_{xy}^L] + F_k - B \frac{\partial X}{\partial t}, \quad (2)$$

где  $\sigma_{xy}^d$  — компонента тензора напряжений, создаваемых точечными дефектами на линии дислокации,  $\sigma_{xy}^L$  — компонента тензора напряжений, создаваемых на этой линии призматическими петлями,  $F_k$  — сила, действующая на дислокацию со стороны остальных дислокаций ансамбля,  $m$  — масса единицы длины дислокации (массы всех дислокаций считаем одинаковыми),  $c$  — скорость распространения в кристалле поперечных звуковых волн,  $B$  — константа демпфирования, обусловленная фоннными, магннными или электронными механизмами диссипации. Здесь, как и в работах [21–27], будем считать выполненным условие  $[Bbv/(mc^2)] \ll 1$ , позволяющее пренебречь влиянием константы  $B$  на силу торможения дислокации структурными дефектами.

Полная сила торможения дислокации будет равна

$$F = F_d + F_L + Bv. \quad (3)$$

Здесь  $F_d$  — сила торможения (drag), обусловленная рассеянием энергии движущейся дислокации точечными дефектами,  $F_L$  — сила торможения дислокации призматическими петлями,  $Bv$  — фоннное торможение.

Сила динамического торможения движущейся краевой дислокации структурными дефектами, согласно [23,24], может быть вычислена по формуле

$$F_{\text{def}} = \frac{nb^2}{8\pi^2 m} \int d^3 q |q_x| |\sigma_{xy}(\mathbf{q})|^2 \delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_z)), \quad (4)$$

где  $\omega(q_z)$  — спектр дислокационных колебаний,  $\sigma_{xy}(\mathbf{q})$  — Фурье-образ компоненты тензора напряжений, созданных соответствующим дефектом (в нашем случае это либо точечный дефект, либо дислокационная петля),  $n$  — объемная концентрация соответствующих дефектов.

В рассматриваемом нами случае спектр дислокационных колебаний имеет вид

$$\omega^2(q_z) = c^2 q_z^2 + \Delta^2. \quad (5)$$

Щель  $\Delta$  в колебательном спектре может возникать благодаря коллективному взаимодействию дефектов с дислокацией и, согласно [23], описывается формулой

$$\Delta = \Delta_{\text{def}} = \frac{c}{b} (n_0 d \varepsilon^2)^{1/3} \approx \frac{c}{l_d}, \quad (6)$$

где  $l_d$  — среднее расстояние между точечными дефектами, случайным образом распределенными в объеме кристалла,  $n_0 d$  — безразмерная концентрация этих дефектов,  $\varepsilon$  — параметр несоответствия точечного дефекта.

Взаимодействие движущихся дислокаций ансамбля также способно влиять на формирование колебательного

спектра. Вклад этого взаимодействия в величину щели, согласно [26], определяется формулой

$$\Delta_{\text{dis}} = \pi b \sqrt{\frac{\mu \rho}{6\pi m(1-\gamma)}} \approx c \sqrt{\rho}, \quad (7)$$

где  $\rho$  — плотность подвижных дислокаций,  $\mu$  — модуль сдвига,  $\gamma$  — коэффициент Пуассона.

В работах [23,24] было показано, что в интервале скоростей  $v < v_L = a\Delta$  сила торможения дислокации призматическими петлями может иметь характер сухого трения. При ударно-волновом воздействии на кристалл плотность подвижных дислокаций значительно возрастает и может достигать значений  $\rho = 10^{15} \text{ м}^{-2}$ . Тогда коллективное взаимодействие дислокаций может стать определяющим при формировании спектра, т.е. будет выполнено условие  $\Delta_{\text{dis}} > \Delta_{\text{def}}$ , которое приближенно можно записать в виде [26]

$$\rho > \frac{1}{b^2} (n_{0d} \varepsilon^2)^{2/3}. \quad (8)$$

Оценки показывают, что для типичных значений  $b = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ,  $\varepsilon = 10^{-1}$ ,  $n_{0d} = 10^{-4}$  это условие может быть выполнено. После несложных вычислений получим выражение для силы торможения дислокации призматическими петлями в виде

$$F_L = \frac{n_L \mu b_0^2 a c}{b} \sqrt{\frac{6m}{\pi \mu \rho (1-\gamma)^3}} \approx \frac{n_L \mu b_0^2 a}{(1-\gamma)^2 \sqrt{\rho}}. \quad (9)$$

Здесь  $n_L$  — объемная концентрация петель.

Как следует из полученной формулы, рост плотности подвижных дислокаций снижает силу их торможения петлями. Таким образом, коллективное взаимодействие дислокаций облегчает преодоление призматических петель.

Полученная формула справедлива для скоростей  $v < v_L = a\Delta_{\text{dis}} \approx ac\sqrt{\rho}$ . Выполним численные оценки. Для значений  $\rho = 10^{15} \text{ м}^{-2}$ ,  $b = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ,  $a = 100b$  получим  $v_L \approx c$ , для  $a = 10b$  соответственно  $v_L \approx 10^{-1}c$ . Полученные значения попадают в исследуемый нами динамический интервал скоростей.

Воспользовавшись результатами работы [27], запишем полную силу торможения дислокации в виде

$$F = F_L + F_d + Bv = \frac{\beta}{\sqrt{\rho}} + \frac{B_d v}{1 + \frac{v^2}{v_0^2}} + Bv, \quad (10)$$

где константа демпфирования  $B_d$ , скорость  $v_0$ , константа  $\beta$  определяются следующими выражениями:

$$B_d = \frac{2(1-\gamma)n_{0d}\varepsilon^2\mu}{\rho bc}, \quad v_0 = b^2 \sqrt{\frac{\pi\mu\rho}{6(1-\gamma)m}} \approx bc\sqrt{\rho}, \quad (11)$$

$$\beta = \frac{n_L \mu b_0^2 a}{(1-\gamma)^2}. \quad (12)$$

Рассмотрим теперь противоположный случай, когда доминирующее влияние на колебательный спектр оказывает взаимодействие дислокации с точечными дефектами:  $\Delta_{\text{dis}} < \Delta_{\text{def}}$ . Он реализуется, например, при  $\rho \leq 10^{14} \text{ м}^{-2}$  и  $n_{0d} = 10^{-2} - 10^{-4}$ . Воспользовавшись результатами работ [23,28], полную силу торможения дислокации представим в виде

$$F = F_L + F_d + Bv = \beta \frac{b}{(n_{0d}\varepsilon^2)^{1/3}} + \frac{B_d v}{1 + \frac{v^2}{v_0^2}} + Bv. \quad (13)$$

Здесь константа  $\beta$  по-прежнему определяется формулой (12), а  $B_d$  и  $v_0$  теперь зависят не от плотности дислокаций, а от концентрации точечных дефектов и имеют вид

$$B_d = \frac{\mu b (n_{0d} \varepsilon^2)^{1/3}}{c}, \quad v_0 = c (n_{0d} \varepsilon^2)^{1/3}. \quad (14)$$

При скорости  $v < v_0$  взаимодействие дефектов с дислокацией имеет коллективный характер [28]. Для значений концентрации точечных дефектов  $n_{0d} = 10^{-2}$  получим  $v_0 = 10^{-1}c$ . При таких скоростях сила торможения дислокации точечными дефектами становится линейной функцией скорости  $F_d = B_d v$ , а зависимость полной силы торможения от концентрации дефектов описывается немонотонной функцией, имеющей минимум

$$F = \frac{\alpha}{n_{0d}^{1/3}} + g n_{0d}^{1/3} + Bv, \quad (15)$$

где константы  $\alpha$  и  $g$  определяются выражениями

$$\alpha = \beta \frac{b}{\varepsilon^{2/3}}, \quad g = \mu b \varepsilon^{2/3} \frac{v}{c}. \quad (16)$$

Найдем значение концентрации точечных дефектов, отвечающее минимуму полной силы торможения,

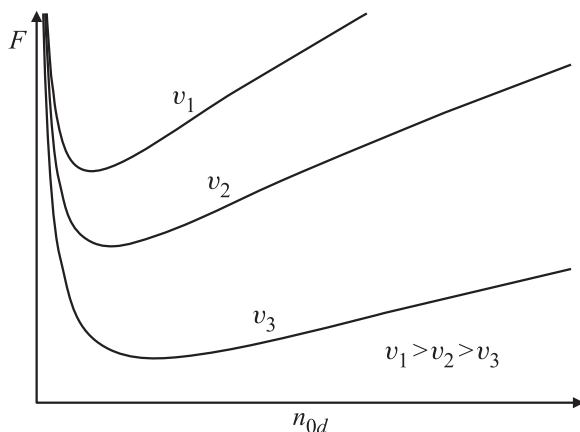
$$n_{\text{min}} = \frac{(n_L b_0^2 a c / v)^{2/3}}{(1-\gamma)^3 \varepsilon^2}. \quad (17)$$

При таком значении концентрации происходит переход от доминирования торможения дислокации петлями к доминированию торможения точечными дефектами.

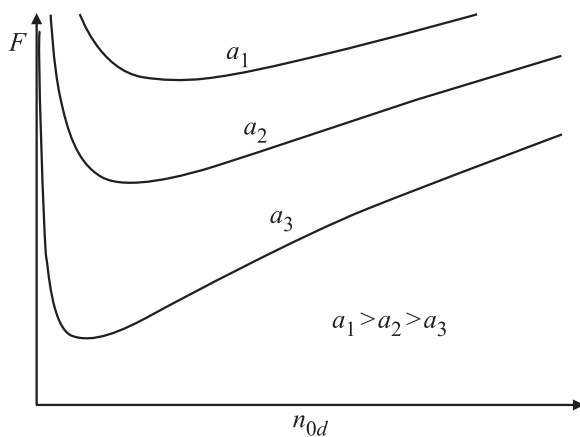
Выполним численную оценку полученной величины. Для  $b_0 = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ,  $\gamma = 0.3$ ,  $\varepsilon = 10^{-1}$ ,  $v = 10^{-2}c$ ,  $a = 100b$ ,  $n_L = 10^{22} \text{ м}^{-3}$  [14] получим  $n_{\text{min}} = 10^{-2}$ .

При анализе выражения (15) может возникнуть вопрос, не будет ли неограниченно возрастать первое слагаемое, описывающее силу сухого трения, при стремлении концентрации точечных дефектов к нулю. На самом деле никакой расходимости здесь нет, поскольку эта формула получена для  $v < v_c$ . Воспользовавшись выражением (14), перепишем это условие в виде

$$n_{0d} > \left(\frac{v}{c}\right)^3 \frac{1}{\varepsilon^2}. \quad (18)$$



**Рис. 2.** Зависимость полной силы торможения дислокации от концентрации точечных дефектов при различных значениях скорости.



**Рис. 3.** Зависимость полной силы торможения дислокации от концентрации точечных дефектов при различных значениях радиуса призматических петель.

Кроме того, как было указано выше, должно выполняться условие  $\Delta_{dis} < \Delta_{def}$ , которое с использованием выражений (6), (7) может быть записано в виде

$$n_{0d} > \frac{(\rho b^2)^{3/2}}{\varepsilon^2}. \quad (19)$$

При типичных значениях  $v = 10^{-2}c$ ,  $\varepsilon = 10^{-1}$ ,  $\rho = 10^{14} \text{ m}^{-2}$  получим, что безразмерная концентрация точечных дефектов для выполнения условий (18) и (19) должна составлять не менее  $10^{-4}$ . Таким образом, в выражении (15) концентрация не только не может стремиться к нулю, но и ограничена областью довольно высоких значений.

Схематически зависимость полной силы торможения от концентрации точечных дефектов для разных значений скорости дислокационного скольжения показана на рис. 2, а для различных значений радиуса дислокационных петель — на рис. 3. С ростом скорости положение минимума в соответствии с формулой (17)

смещается в сторону меньших значений концентрации, а с увеличением радиуса петель — в сторону больших значений.

Полученные результаты могут быть полезны при анализе высокоскоростной деформации кристаллов.

## Список литературы

- [1] Г.А. Малыгин, С.Л. Огарков, А.В. Андрияш. ФТТ **56**, 1123 (2014).
- [2] M. Molotskii. Appl. Phys. Lett. **93**, 051905 (2008).
- [3] Г.И. Канель, В.Е. Фортов, С.В. Разоренов. УФН **177**, 809 (2007).
- [4] Г.А. Малыгин. ФТТ **57**, 75 (2015).
- [5] D. Tramontina, E. Bringa, P. Erhart, J. Hawrelak, T. Germann, R. Ravelo, A. Higginbotham, M. Suggit, J. Wark, N. Park, A. Stukowski, Y. Tang. High Energy Density Phys. **10**, 9 (2014).
- [6] M.A. Meyers, H. Jarmakani, E.M. Bringa, B.A. Remington. Dislocation in solids. V. 15 / Eds J.P. Hirth, L. Kubin, B.V. Elsevier (2009). Ch. 89. P. 96.
- [7] И.Н. Бородин, А.Е. Майер. ЖТФ **83**, 8, 76 (2013).
- [8] В.И. Зельдович, Е.В. Шорохов, С.В. Добаткин, Н.Ю. Фролова, А.Э. Хейфец, И.В. Хомская, П.А. Насонов, А.А. Ушаков. ФММ **111**, 439 (2011).
- [9] А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин. ДАН **413**, 615 (2007).
- [10] В.В. Красников, А.Ю. Куксин, А.Е. Майер, А.В. Янилкин. ФТТ **52**, 1295 (2010).
- [11] А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ДАН **420**, 467 (2008).
- [12] Г.А. Малыгин. ФТТ **49**, 961 (2007).
- [13] Ж. Фридель. Дислокации. Мир, М. (1967). 644 с.
- [14] Р. Хоникомб. Пластическая деформация металлов. Мир, М. (1972). 408 с.
- [15] В.В. Слезов, А.В. Субботин, О.А. Осмаев. ФТТ **47**, 463 (2005).
- [16] Л.И. Миркин. Физические основы прочности и пластичности. Изд-во МГУ, М. (1968). 540 с.
- [17] K. Yashiro, M. Konishi, Y. Tomita. Comput. Mater. Sci. **43**, 481 (2008).
- [18] Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon, Z. Rong, B.N. Singh. Phil. Mag. Lett. **84**, 745 (2004).
- [19] Z. Rong, D.J. Bacon, Yu.N. Osetsky. Mater. Sci. Eng. A **400**, 378 (2005).
- [20] R.E. Voskoboynikov, Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon. Mater. Sci. Eng. A **400**, 54 (2005).
- [21] В.В. Малащенко. ФТТ **50**, 1788 (2008).
- [22] V.V. Malashenko. Modern Phys. Lett. B **23**, 2041 (2009).
- [23] В.В. Малащенко. ФТТ **53**, 2204 (2011).
- [24] V.V. Malashenko. Physica B **404**, 3890 (2009).
- [25] В.В. Малащенко. Письма в ЖТФ **38**, 19, 61 (2012).
- [26] В.В. Малащенко. ФТТ **56**, 1528 (2014).
- [27] В.В. Малащенко. ФТТ **57**, 2388 (2015).
- [28] В.В. Малащенко. ФТТ **49**, 78 (2007).