

УДК 539.37

## ВРЕМЯ ФОРМИРОВАНИЯ ЗОНЫ СДВИГА В ГЦК МАТЕРИАЛАХ

© Л.Е. Попов, С.Н. Колупаева, М.И. Слободской, С.И. Пуспешева

Россия, Томск, Государственный архитектурно-строительный университет

Popov L.E., Kolupaeva S.N., Slobodskoy M.I., Puspesheva S.I. The time of shearing zone formation in f.c.c. materials. The dislocation dynamics of the crystallographic slip zone formation is investigated. It is assumed that the dislocation line tension is constant and the closed dislocation loop keeps the form of the circle of the current radius  $r$  in the process of its expansion. The time of shearing zone formation for various initial states of f.c.c. materials is estimated.

Формоизменение кристаллических тел при механических взаимодействиях обычно происходит в результате суперпозиции и совместного проявления нескольких различных явлений (двойникования, кристаллографического скольжения, диффузионного массопереноса, бездиффузионных фазовых переходов). Кристаллографическое скольжение – наиболее универсальное явление, ответственное за пластическую деформацию кристаллов [1].

Естественным базовым процессом пластической деформации скольжения является распространение элементарного кристаллографического сдвига. Границей распространяющегося элементарного кристаллографического скольжения является замкнутая расширяющаяся дислокация. Таким образом, динамика кристаллографического скольжения есть динамика замкнутых планарных дислокаций.

Для того чтобы получить близкую к реальной картину эволюции распространяющегося элементарного скольжения, необходимо рассматривать движение замкнутой дислокационной конфигурации в поле дискретных стопоров, приближая его характеристики к наблюдаемым экспериментально, как поступают при имитационном моделировании [2, 3]. Однако перколяционный характер продвижения дислокации в случайном поле дискретных стопоров и чрезвычайно сложный характер возникающих в этом процессе дислокационных конфигураций не позволяют проследить глобальное поведение элементарного скольжения. Поэтому для описания динамики кристаллографического скольжения представляется полезным использовать предельно упрощенные модели.

Рассмотрим расширение дислокационной петли, охватывающей область элементарного кристаллографического скольжения, под действием сил, обусловленных внешним напряжением, силами линейного натяжения и динамического торможения. Поле дискретных стопоров дислокационной природы заменим однородной и изотропной средой, оказывающей такое же сопротивление движению дислокации, что и исходное поле препятствий. Тогда в приближении постоянного линейного натяжения замкнутая дислокация, связанная с элементарным скольжением, расширяясь, будет сохранять форму окружности. После испускания первой замкнутой дислокационной петли активность дислокационного источника не прекращается, поскольку вос-

становленный после замыкания первой дислокации источник обладает некоторой кинетической энергией и проходит критическую конфигурацию в динамическом режиме. Поэтому дислокационный сегмент-источник после активации испускает серию замкнутых дислокаций, и все дислокации, начиная со второй, движутся в поле обратных напряжений, возрастающих с увеличением числа произведенных и накопленных у непрозрачных для кристаллографического скольжения барьеров дислокаций.

В таком приближении уравнение динамики  $i$ -й замкнутой расширяющейся дислокации, испущенной источником, имеет вид [4]:

$$\frac{d\varepsilon_k}{dr} = (\tau - \tau_R) b - \frac{\mu_0 + \varepsilon_k}{r} - \frac{Gb^2(i-1)}{2\pi} \frac{2-\nu}{2(1-\nu)} \frac{1}{D/2-r} - Bv, \quad (1)$$

где  $\tau$  – напряжение, обусловленное действием внешних сил,  $\tau_R = \tau_f + \tau_d$ , где  $\tau_f$  – напряжение решеточного и

примесного трения, а  $\tau_d = \alpha G b \rho^{1/2}$  – дислокационное сопротивление распространению кристаллографического скольжения,  $\alpha$  – параметр, характеризующий интенсивность междислокационных взаимодействий,  $\varepsilon_k$  – кинетическая энергия единицы длины движущейся дислокации,  $r$  – радиус дислокации,  $B$  – коэффициент вязкого торможения,  $G$  – модуль сдвига,  $b$  – модуль вектора Бюргерса,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $\rho$  – плотность дислокаций,  $i$  – порядковый номер дислокации,  $D$  – средний диаметр зоны сдвига,  $\mu_0$  – линейное натяжение покоящейся дислокации. Первая дислокация пробегает расстояние  $D/2$ , где  $D = \frac{B}{Gb} \frac{\tau}{\rho}$  – диаметр

зоны сдвига [5], здесь  $B = 500 \dots 1000$  – некоторый вычисляемый параметр.

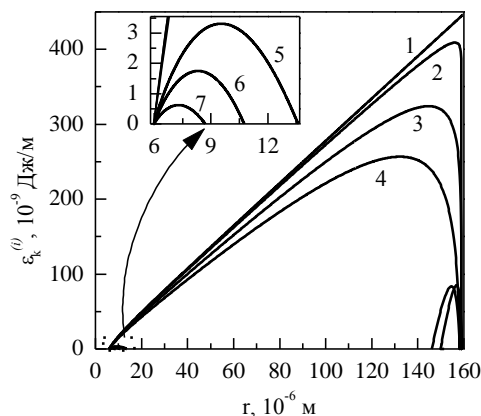
В уравнении (1) не учитываются силы торможения скользящих дислокаций, связанные с производством при кристаллографическом скольжении точечных дефектов – межузельных атомов и вакансий. С учетом этих сил уравнение динамики  $m$ -ой замкнутой дислокации, испущенной источником, принимает вид:

$$\frac{d\varepsilon_k}{dr} = (\tau - \tau_R) b - \frac{\mu_0 + \varepsilon_k}{r} - \frac{p_j p_s \xi}{8} G b^2 \rho r - \frac{G b^2 (m-1)}{2\pi} \frac{2-\nu}{2(1-\nu)} \frac{1}{D/2-r} - B\nu \quad (2)$$

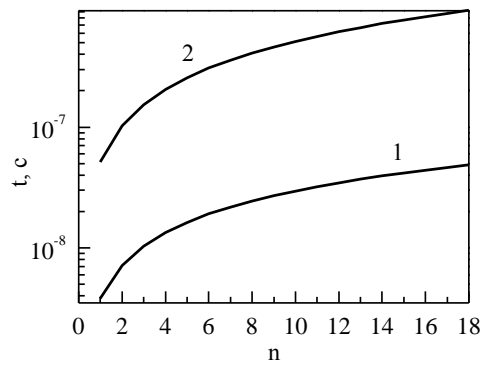
где  $\xi$  – множитель Смоллмена ( $\xi = \rho_f/\rho$ ,  $\rho_f$  – число дислокаций некопланарных систем, пересекающих единицу площади плоскости скольжения),  $p_j$  – доля порогаобразующих дислокаций некопланарных систем,  $p_s$  – доля порогов на дислокациях ориентации, близкой к винтовой, производящих точечные дефекты,  $D$  – диаметр зоны сдвига, который в данном случае определяется диаметром первой дислокационной петли, испущенной источником, в момент остановки.

Результаты численных расчетов в моделях (1) и (2) приведены на рис. 1–4. Для расчетов были использованы следующие значения параметров (характерные для никеля):  $\xi = 0,5$ ,  $G = 8 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>,  $\rho = 10^{13}$  м<sup>-2</sup>,  $\alpha = 0,5$ ,  $B = 10^{-5}$  П,  $b = 2,5 \cdot 10^{-10}$  м,  $\tau_f = 1$  МПа,  $\nu = 1/3$ ,  $p_j = 0,5$ ,  $p_s = 1/3$  [5, 6]. Во-первых, следует отметить отличие в поведении первой дислокации (рис. 1) по результатам расчетов в моделях (1) и (2). Если в модели, не учитывающей генерацию точечных дефектов, первую дислокацию приходилось останавливать при достижении ею среднего диаметра зоны сдвига, то в модели, учитывающей генерацию точечных дефектов, она останавливается сама и определяет диаметр зоны сдвига. В первом случае диаметр зоны сдвига равен 159 мкм, а во втором – 14 мкм. Во-вторых, значения кинетической энергии, достигаемые при движении дислокаций, и время движения дислокаций (рис. 2) в моделях с учетом генерации точечных дефектов и без учета, также отличаются приблизительно на порядок.

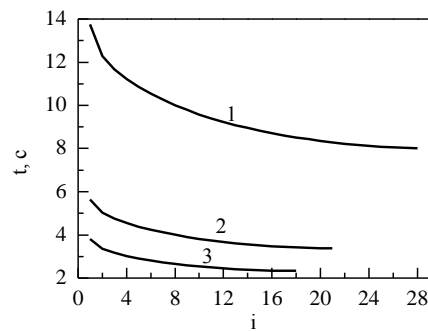
Следует отметить, что в модели, учитывающей генерацию точечных дефектов, число дислокаций, формирующих зону сдвига, значительно меньше, чем в модели, не учитывающей производство точечных дефектов.



**Рис. 1.** Зависимость кинетической энергии дислокационных петель от радиуса с учетом (кривые 1–4) и без учета (кривые 5–7) генерации точечных дефектов. Приведены следующие дислокации, испущенные источником: 1 (кривые 1 и 5), 5 (кривая 6), 10 (кривые 2 и 7), 50 (кривая 3) и 100 (кривая 4)



**Рис. 2.** Время формирования зоны сдвига с учетом (1) и без учета (2) генерации точечных дефектов;  $n$  – количество дислокаций, испущенных источником

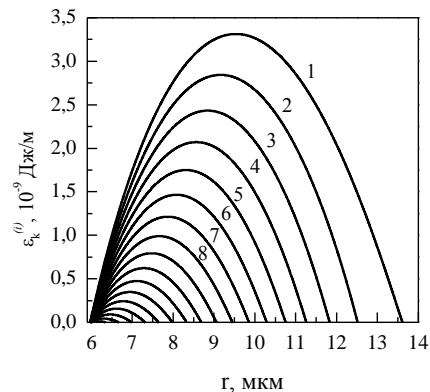


**Рис. 3.** Времена пробега  $i$ -ой дислокации до ее остановки при различных значениях плотности дислокаций  $\rho$ : 1)  $\rho = 10^{12}$  м<sup>-2</sup>, 2)  $\rho = 5 \cdot 10^{12}$  м<sup>-2</sup>, 3)  $\rho = 10^{13}$  м<sup>-2</sup>

Так, например, в никеле при плотности дислокаций  $10^{13}$  м<sup>-2</sup> в формировании зоны сдвига участвуют 18 дислокаций.

При учете сил торможения, связанных с генерацией точечных дефектов, время пробега дислокаций, и, следовательно, время формирования зоны сдвига уменьшается примерно в 10 раз, от времени порядка сотен наносекунд до десятков наносекунд (рис. 2).

На рис. 3 приведено время пробега дислокаций при разных значениях плотности дислокаций. Видно, что с



**Рис. 4.** Зависимость кинетической энергии дислокаций, испущенных источником, от радиуса в модели, учитывающей генерацию точечных дефектов. Цифрами у кривых указаны номера дислокаций

уменьшением плотности дислокаций время пробега каждой дислокации и, следовательно, время формирова-

ния зоны сдвига увеличиваются. Также увеличиваются пробег первой дислокации и число дислокаций, участвующих в образовании зоны сдвига. Так, например, если при плотности дислокаций, равной  $10^{13} \text{ м}^{-2}$ , время пробега первой дислокации 3,8 нс, а количество дислокаций, участвующих в формировании зоны сдвига, равно 18, и при этом время образования зоны сдвига составляет примерно 48 нс, то при плотности дислокаций, равной  $10^{12} \text{ м}^{-2}$ , время пробега первой дислокации 14 нс, число дислокаций, формирующих зону сдвига, равно 28, и время формирования зоны сдвига 270 нс.

Расчеты для никеля и меди показали, что в никеле дислокации приобретают большую кинетическую энергию, чем в меди, но в меди время пробега дислокаций больше, чем время пробега соответствующей дислокации в никеле, и, следовательно, время формирования зоны сдвига в меди больше, чем в никеле. При одинаковых условиях деформирования время пробега первой дислокации в никеле составляет около 3,8 нс, в формировании зоны сдвига могут участвовать 18 дислокаций, время формирования зоны сдвига около 48 нс, а в меди время пробега первой дислокации около 4,8 нс, в формировании зоны сдвига могут участвовать 17 дислокаций, время формирования зоны сдвига около 59 нс.

На рис. 4 приведена кинетическая энергия серии из

18 дислокаций, рассчитанная в модели, учитывающей силы торможения, связанные с генерацией точечных дефектов в никеле при плотности дислокаций  $10^{13} \text{ м}^{-2}$ . Как следует из рисунка, первые дислокации располагаются более свободно, чем последующие.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Вернадский В.И.* Явления скольжения кристаллического вещества. Ученые записки императорского Московского университета, ест.-ист. отдел, физико-кристаллографические исследования. М.: Университетская типография, 1897. 182 с.
2. *Слободской М.И., Матюченко А.В.* Имитационное моделирование генерации дислокационной петли в поле случайно расположенных дискретных препятствий // Математ. моделир. систем и процессов. 1996. № 4. С. 88-95.
3. *Слободской М.И., Попов Л.Е.* Особенности работы источника Франка-Рида в поле случайно расположенных препятствий // Изв. АН. Сер. физическая. 1998. Т. 62. № 7. С. 1338-1343.
4. *Попов Л.Е., Колупаева С.Н., Вихорь Н.А., Пуспешева С.И.* Дислокационная динамика кристаллографического скольжения // Математ. моделир. систем и процессов. 1999. № 7. С. 67-74.
5. *Попов Л.Е., Кобьтев В.С., Ковалевская Т.А.* Пластическая деформация сплавов. М.: Металлургия, 1984. 183 с.
6. *Колупаева С.Н., Старенченко В.А., Попов Л.Е.* Неустойчивости пластической деформации кристаллов. Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1994. 301 с.