

УДК 548.4

С. И. ИГОНИН, А. А. ПРЕДВОДИТЕЛЕВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ ВБЛИЗИ ПОЛОС СКОЛЬЖЕНИЯ

С помощью моделирования на ЭВМ проведено исследование поведения дислокаций вблизи полос скольжения, составленных из краевых либо из винтовых дислокаций. Получены распределения для стартовых напряжений дислокаций, длин пробега и величин поперечного скольжения в зависимости от уровня внешнего напряжения, расстояния от полосы скольжения и ориентации кристалла. Проведено сопоставление данных моделирования с некоторыми экспериментальными данными.

В связи с развитием пластической деформации кристаллов большой интерес представляют исследования движения дислокаций вблизи полос скольжения. При этом особое внимание заслуживает анализ полей внутренних напряжений, создаваемых полосой скольжения, которые могут оказывать существенное влияние на движение дислокаций и на их способность к поперечному скольжению. К сожалению, прямые экспериментальные исследования в этом направлении затруднительны. Поэтому в настоящей работе для анализа подобного рода движения дислокаций было использовано моделирование.

Описание модели

Моделирование проводилось применительно к кристаллам со структурой типа NaCl.

Были рассмотрены два варианта модели полос скольжения, составленных из жестких прямолинейных дислокаций, с векторами Бюргерса $1/2 [\bar{1}01]$ и $1/2 [10\bar{1}]$. В первом варианте полоса скольжения состояла из краевых, во втором — из винтовых дислокаций, расположенных в плоскостях (101).

Дислокации разных знаков (кружки и точки на рис. 1) составляли по 50% и каждая группа их размещалась случайным образом в полосе шириной y_0 .

Пробная дислокация¹ во всех случаях была параллельна дислокациям полосы и могла двигаться в плоскости (101), параллельной полосе, под действием напряжений, создаваемых как дислокациями самой полосы $\tau^{вн}$, так и внешним полем τ . В первом варианте модели пробная

¹ Пробной дислокацией будем называть дислокацию, движение которой исследуется вблизи полосы.

дислокация была краевой, а во втором — винтовой. Чтобы смоделировать процесс поперечного скольжения, во втором варианте модели пробной дислокации помимо основной плоскости скольжения (101) при подходящих условиях разрешалось также движение в плоскости поперечного скольжения (010).

Пробная дислокация испытывает сопротивление типа «сухого трения» величиной $\tau_{(101)}^0$ при скольжении в плоскости (101) и $\tau_{(010)}^0$ — в плоскости (010)¹.

Начальное местоположение пробной дислокации задавалось двумя способами. В одном случае считалось, что дислокация может находиться только на трех участках, где действие на нее полей внутренних напряжений уравновешено силами трения (что соответствует расширению полосы скольжения после разгрузки и повторного нагружения). На этих участках вероятность нахождения пробной дислокации в различных точках считалась одинаковой. В другом случае предполагалось, что пробная дислокация могла появляться в любой точке плоскости скольжения (что соответствует процессу расширения полосы за счет поперечного скольжения при активном нагружении).

При анализе полей внутренних напряжений рассматривались только такие компоненты напряжений, которые вызывают движение пробной дислокации. Поэтому для первого варианта модели вычислялся компонент $\tau_{(101)}^{вн}$, а для второго — $\tau_{(101)}^{вн}$ и $\tau_{(010)}^{вн}$. Для того чтобы исключить при расчетах влияние краев полосы, поле внутренних напряжений рассчитывалось только на некотором ограниченном интервале x_0 , а положения дислокаций помимо этого интервала задавались на соседних примыкающих участках полосы длины x^0 . В каждой точке (x, y) плоскости скольжения пробной дислокации учитывалось действие всех дислокаций в полосе, удовлетворяющих условию $|x - x_i| \leq x_0$.

Расчеты проводились для плотности дислокаций в полосе $\rho = 10^7 \text{ см}^{-2}$. Координаты дислокаций (x_i, y_i) в полосе рассчитывались на ЭВМ с помощью стандартных подпрограмм для псевдослучайных чисел. Поля внутренних напряжений для первого варианта модели были: $x_0 = 1000 \text{ мк}$, $x^0 = 500 \text{ мк}$, $y_0 = 3 \text{ мк}$, $y = 3, 5, 10, 30$ и 50 мк . Это соответствовало учету действия ~ 300 дислокаций полосы скольжения. Для второго варианта: $x = 1000 \text{ мк}$, $x^0 = 125 \text{ мк}$, $y_0 = 10 \text{ мк}$, $y = 10, 11, 12, 13, 14$ и 15 мк . В этом случае учитывалось действие ~ 250 дислокаций полосы. Значение $\tau_{(101)}^0$ равно 30 г/мм^2 [3—6], $\tau_{(010)}^0 = 150 \text{ г/мм}^2$ [7].

Поле внутренних напряжений вблизи полос скольжения

На основе описанной модели можно получить ряд важных характеристик поля внутренних напряжений, создаваемых полосой скольжения. Были построены профили изменения напряжений $\tau_{(101)}^{вн}$ и $\tau_{(010)}^{вн}$ вдоль траектории возможного движения пробных дислокаций. По этим профилям были найдены распределения амплитуд внутренних напряжений σ_A и расстояний λ между соседними точками, где $\tau^{вн} = 0$. В двойных логарифмических координатах значения $\bar{\tau}_A$ в зависимости от $y - y_0/2$ хорошо ложатся на прямую линию, причем тангенс угла наклона этой прямой оказывается близким к единице. Это указывает на то, что по мере удаления от полосы скольжения средняя амплитуда внутренних напряжений, создаваемых полосой, уменьшается обратно пропорционально расстоянию от полосы. Хотя подобный результат и не является

¹ О возможной физической природе «сухого трения» дислокаций см. в [1—4].

неожиданным, поскольку напряжения, создаваемые единичными дислокациями $\sim y^{-1}$, тем не менее он требовал проверки, так как компенсация полей отдельных дислокаций в полосе может привести и к иному закону изменения средней амплитуды напряжений. Что касается $\bar{\lambda}$, то оно резко возрастает по мере удаления от полосы скольжения, причем даже минимальное значение при $y=y_0$ оказывается $\sim 2 \div 4 (\sqrt{\rho})^{-1}$,

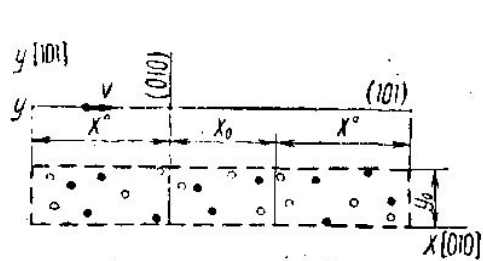


Рис. 1. Схема расположения пробной дислокации и дислокаций в «винтовой» полосе скольжения в кристаллах NaCl

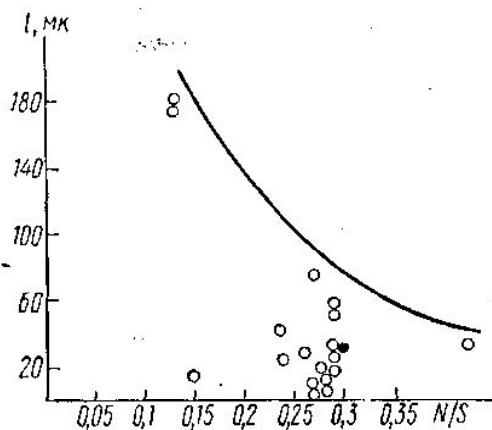


Рис. 3. Зависимость длины пробега дислокаций от линейной плотности дислокаций в краевой полосе скольжения для $\Delta y=20$ мк и $\tau_{(101)}=25$ г/мм². Черная точка соответствует данным моделирования

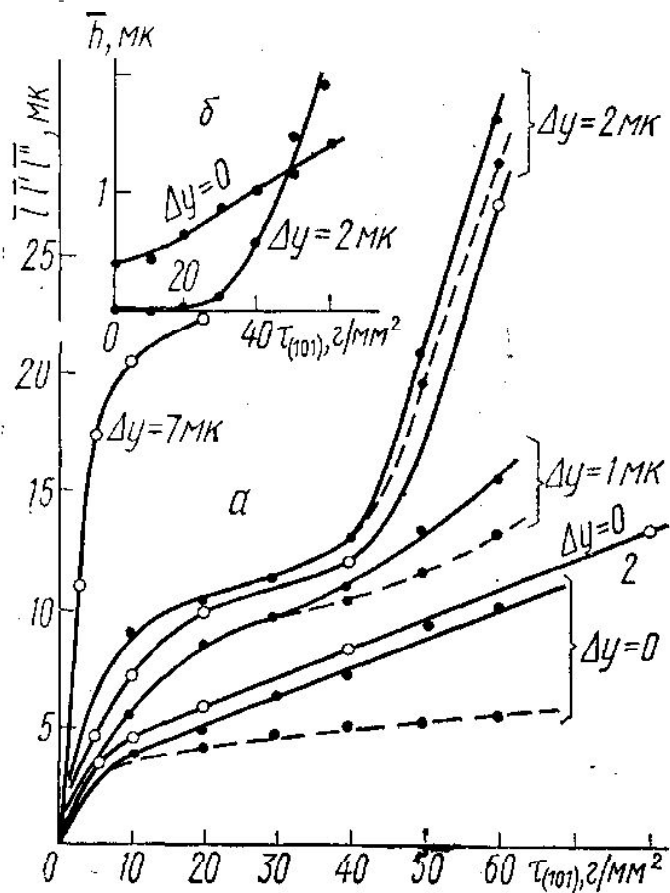


Рис. 2. Зависимость длины пробега (а) краевых (l , светлые кружки) и винтовых (l' , l'' , черные точки, пунктирные и сплошные кривые) дислокаций и величин выброса h (б) от величины внешнего напряжения $\tau_{(101)}$ и расстояния от полосы скольжения Δy

т. е. много больше среднего расстояния между дислокациями в полосе скольжения.

Синхронное вычисление компонентов $\tau_{(101)}^{вн}$ и $\tau_{(010)}^{вн}$ в каждой точке (x, y) дает возможность проверить наличие или отсутствие корреляции между этими компонентами поля. Было установлено, что компоненты скалывающих напряжений внутреннего поля напряжений в плоскостях (101) и (010), создаваемые дислокациями в полосе скольжения, никак не коррелируют между собой. Этот результат представляется весьма интересным, так как указывает на то, что движение дислокации в основной и поперечной плоскостях скольжения является не скоррелированным. Иными словами, выход дислокации в поперечную плоскость скольжения (если он обусловлен внутренним полем) можно рассматривать как случайный процесс по отношению к процессу движения дислокации в основной плоскости скольжения.

Рассмотрим стартовые напряжения дислокаций, находящихся в поле напряжений полосы скольжения. Согласно методике [8], были получены распределения для стартовых напряжений пробных дислокаций. В тех случаях, когда средняя амплитуда внутренних напряжений оказывается близкой к уровню «сухого трения» дислокаций в данном кристалле, на кривых распределения появляется максимум. При этом дисперсия распределений оказывается очень чувствительной к степени удаленности пробной дислокации от полосы скольжения и уменьшается при возрастании этого расстояния. Эти закономерности дают теоретическую основу для разработки экспериментальной методики нахождения распределения поля внутренних напряжений, создаваемых полосой скольжения.

Моделирование движения дислокаций вблизи полосы скольжения

Моделирование движения пробной дислокации в поле напряжений полосы скольжения проводилось по методике [8], в предположении, что остановка дислокаций регулируется условием

$$\tau_{(101)} + \tau_{(101)}^{\text{вн}} - \tau_{(101)}^0 \text{sign}(\tau_{(101)} + \tau_{(101)}^{\text{вн}}) = 0.$$

Были получены распределения и средние значения l длин пробега пробных дислокаций в зависимости от $\Delta y = y - y_0$, величины $\tau_{(101)}^0$ и уровня внешнего напряжения. На рис. 2, а в качестве примера приведены зависимости $\bar{l} = \bar{l}(\tau_{(101)}, y - y_0)$ для краевых дислокаций, двигающихся вблизи «краевой» полосы скольжения. Для винтовой полосы имеют место аналогичные закономерности. Таким образом, моделирование процесса движения дислокаций вблизи полосы скольжения позволяет заключить, что внутренние поля напряжений, создаваемые полосой вблизи ее края, обладают настолько высокой неоднородностью, что движение дислокации ни в коем случае не может быть перманентным. Вполне вероятно, что дислокация встретит на своем пути мощный пик внутренних напряжений и будет полностью заторможена. Это означает, что при описании процесса движения дислокации у края полосы лимитирующим фактором должна являться не скорость ее движения, а длина свободного пробега. Проведенные экспериментальные исследования движения пробных искусственно введенных дислокаций вблизи «краевых» полос скольжения¹ показали, что подобные остановки дислокаций действительно имеют место. При этом в полном соответствии с данными моделирования l увеличивается по мере удаления от полосы скольжения и уменьшается с возрастанием плотности дислокаций в полосе. На рис 3 видно, что экспериментально наблюдаемые значения l хорошо отвечают данным моделирования.

Движение пробной винтовой дислокации вблизи полосы с учетом возможного поперечного скольжения

В кристаллах типа NaCl винтовая дислокация помимо движения в системе легкого скольжения {110} может двигаться в плоскости поперечного скольжения {100}, хотя в плоскости {100} винтовой дислокации препятствует значительно больший по сравнению с системой легкого скольжения уровень трения. Синхронное вычисление компонен-

¹ Экспериментальные исследования движения дислокаций вблизи полос скольжения проведены М. В. Захаровой и М. А. Кузнецовой.

тов $\tau_{(101)}^{BH}$ и $\tau_{(010)}^{BH}$ вдоль траектории движения пробной дислокации позволило провести анализ ее движения с учетом возможного поперечного скольжения. Подобный анализ может быть осуществлен, если по мере ее движения в системе легкого скольжения учитывать случаи, благоприятные с точки зрения реализации поперечного скольжения, т. е. когда одновременно будут выполнены два условия:

$$\tau_{(101)} + \tau_{(101)}^{BH} - \tau_{(101)}^0 \text{sign}(\tau_{(101)} + \tau_{(101)}^{BH}) > 0,$$

$$\tau_{(010)} + \tau_{(010)}^{BH} - \tau_{(010)}^0 \text{sign}(\tau_{(010)} + \tau_{(010)}^{BH}) > 0.$$

Здесь внешние напряжения $\tau_{(101)}$ и $\tau_{(010)}$, действующие соответственно в (101) и (010), связаны между собой условием Шмида $\tau_{(010)} = k\tau_{(101)}$.

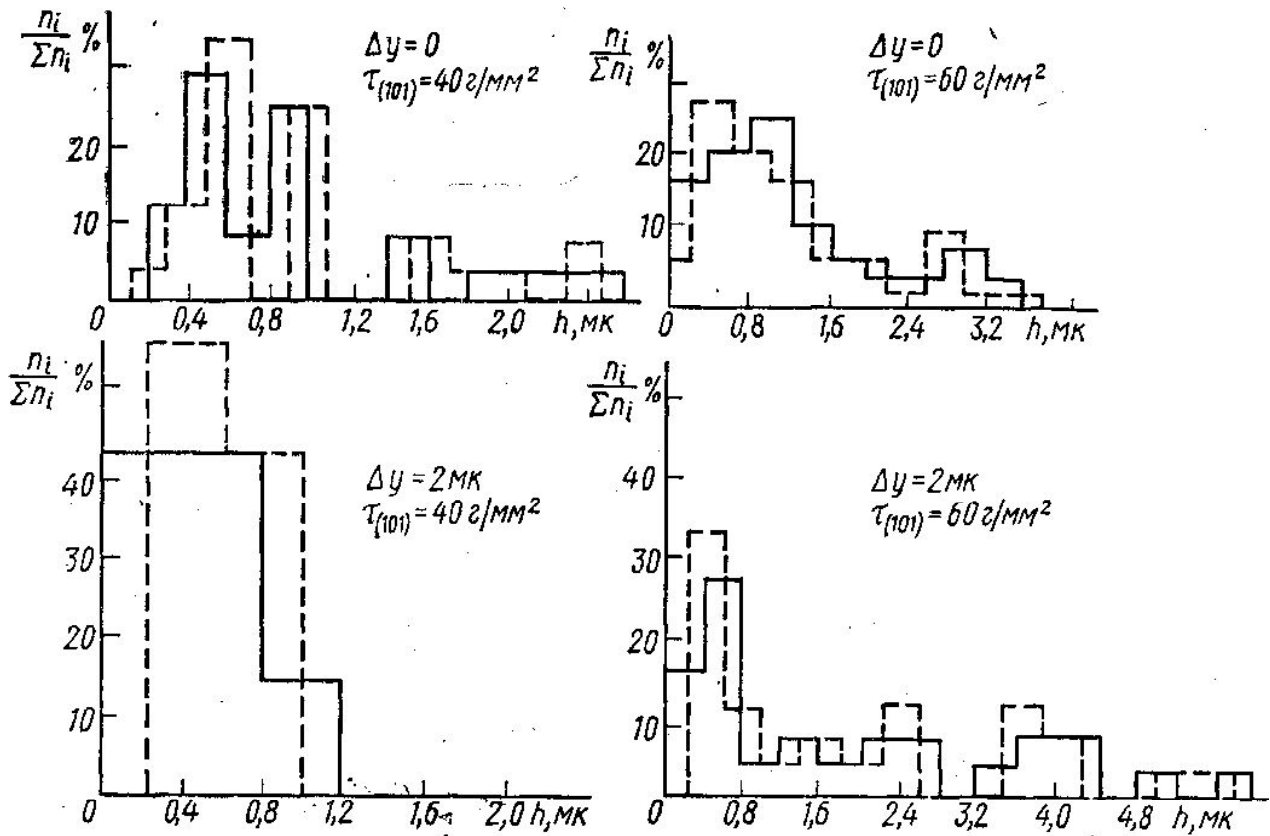


Рис. 4. Распределение h в зависимости от $\tau_{(101)}$ и Δy

При сжатии кристалла вдоль $\langle 100 \rangle k=0$, поэтому в этом случае вклад в поперечное скольжение вносит только поле, создаваемое самой полосой скольжения. При сжатии вдоль $\langle 110 \rangle k = \sqrt{2}$, так что в плоскости поперечного скольжения появляется дополнительная активная составляющая. Подобное моделирование дает возможность получить ряд важных характеристик движения дислокаций: длину пробега дислокации l' до момента ее выхода в поперечную плоскость скольжения, финальную длину пробега дислокации l'' и высоту выброса h пробной дислокации в поперечной плоскости скольжения. Были получены распределения указанных величин в зависимости от уровня внешнего напряжения, степени удаленности пробной дислокации от полосы скольжения Δy и направления сжатия кристалла. На рис. 2, а в качестве примера приведены зависимости средних значений длин пробега l' и l'' от внешнего напряжения $\tau_{(101)}$, степени удаленности от полосы

скольжения для двух значений Δy при сжатии кристалла вдоль $\langle 110 \rangle$. Поведение средних значений \bar{h} в зависимости от $\tau_{(101)}$ при сжатии кристалла вдоль $\langle 110 \rangle$ показано на рис. 2, б. Видно, что с увеличением $\tau_{(101)}$ \bar{h} увеличивается. Вместе с тем зависимость \bar{h} от $\Delta y = y - y_0$ более сложная. При малых значениях $\tau_{(101)}$ величина \bar{h} падает с увеличением $y - y_0$; а при достижении $\tau_{(101)}$ достаточно большой величины средний выброс \bar{h} возрастает с увеличением Δy . Для выяснения причин подобной сложной зависимости $\bar{h} = \bar{h}(\tau, y - y_0)$ были построены распределения для h (рис. 4). Видно, что при малых τ эффективным оказывается множество мелких короткодействующих пиков внутренних напряжений $\tau_{(010)}^{вн}$, встречающихся на пути пробной дислокации при ее движении в плоскостях, близких к полосе скольжения. Однако по мере возрастания Δy вклад в поперечное скольжение дают лишь более мощные и далекодействующие пики внутренних напряжений $\tau_{(010)}^{вн}$, выбрасывающие движущуюся дислокацию на большее расстояние. Поэтому при больших напряжениях с точки зрения дальности выброса пробной дислокации в плоскости (010) оказываются эффективными более удаленные от полосы плоскости скольжения (101) пробной дислокации. Следует отметить, что в рамках рассматриваемой модели $\bar{l}'' > \bar{l}'$, т. е. поперечное скольжение дает возможность дислокации как бы обходить участки с высоким значением тормозящего напряжения, причем разница между \bar{l}' и \bar{l}'' увеличивается с увеличением $\tau_{(101)}$ и уменьшается по мере удаления от полосы. Это обстоятельство проявляется также в наличии четкой корреляции между h и величиной l'' . Поперечное скольжение «помогает» пробной дислокации совершить более дальний пробег за счет движения в более удаленной от полосы плоскости скольжения (101), в которой тормозящее действие внутреннего поля $\tau_{(101)}^{вн}$ ослаблено по сравнению с тем полем, которое действовало бы на пробную дислокацию, если бы та скользила в своей изначальной плоскости (101).

В заключение заметим, что способ задания начального положения пробной дислокации не оказывает существенного влияния на результаты моделирования. Некоторое различие в поведении \bar{l}' и \bar{h} наблюдается лишь при малых значениях $\tau_{(101)}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Предводителей А. А. Сб. «Динамика дислокаций». Харьков, 1968, стр. 311.
2. Предводителей А. А. Сб. «Физика деформационного упрочнения монокристаллов». Киев, 1972, стр. 74.
3. Московская Т. А., Предводителей А. А., Захарова М. В. Сб. «Взаимодействие между дислокациями и атомами примесей и свойства металлов». Тула, 1974, стр. 71.
4. Московская Т. А., Предводителей А. А., Захарова М. В. «Изв. вузов», физика, № 8, 153, 1973.
5. Предводителей А. А., Степанова В. М., Носова Н. А. «Кристаллография», 11, 632, 1966.
6. Предводителей А. А., Ракова Н. К., Нан Хун-бинь. «Физика твердого тела», 9, 300, 1967.
7. Степанов А. В., Милькаманович Е. А. ЖЭТФ, 18, 769, 1948.
8. Стратан И. В., Предводителей А. А. «Физика твердого тела», 12, 1729, 1970.

Поступила в редакцию
18.6.1974 г.

Кафедра
молекулярной физики