Физика и техника высоких давлений 2019, том 29, № 4

PACS: 61.72.Ji, 61.72.Lk

В.В. Малашенко[1,2], Т.И. Малашенко[3,4], А.П. Лукьянченко[4]

ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИЙ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

[1]Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

[2]Донецкий национальный университет

[3]Донецкий национальный технический университет

[4]Донецкий национальный университет экономики и торговли им. М. Туган-Барановского

Статья поступила в редакцию 16 сентября 2019 года

Кратко изложены основные положения теории динамического взаимодействия структурных дефектов. Приведены результаты решения различных задач о динамическом движении дислокаций. Численные оценки показывают важность исследуемого механизма диссипации. Теория динамического взаимодействия структурных дефектов позволяет объяснить ряд экспериментальных результатов.

Ключевые слова: структурные дефекты, дислокации, прочность, пластичность, высокоскоростная пластическая деформация

В настоящее время наблюдается повышение интереса к исследованию динамических дислокационных эффектов, поскольку они играют весьма важную роль в таких процессах, как высокоскоростная обработка материалов, эксперименты по пробиванию оболочек, динамическое канально-угловое прессование, использование взрыва для обработки и сварки металлов, ударно-волновое воздействие, создаваемое в том числе коротковолновым лазерным излучением огромной мощности и высокоэнергетическими корпускулярными потоками [1–8]. Интенсивное развитие численных методов, особенно метода молекулярной динамики, позволило получить наглядное представление о происходящих при этом динамических процессах, однако ряд экспериментальных данных не нашел теоретического объяснения. В их числе немонотонная зависимость предела текучести от скорости деформации и, в частности, наличие области отрицательной скоростной зависимости, линейная зависимость константы динамического торможения дислокаций точечными дефектами от их параметра несоответствия и скорости дислокационного скольжения, корневая зависимость этой константы от концентрации указанных дефектов. Развитая нами теория динамического взаимодействия структурных дефектов позволяет решить широкий круг задач дислокационной динамики, объясняет упомянутые выше экспериментальные закономерности и предсказывает существование новых динамических эффектов, тем самым стимулируя целенаправленную постановку новых экспериментов [9–12]. Эта теория основана на модифицированной нами струнной модели Гранато–Люкке, в рамках которой дислокация рассматривается как струна с эффективным линейным натяжением и эффективной массой полевого происхождения.

В ходе высокоскоростного деформирования скорость пластической деформации достигает значений 10^3–10^8 s^{-1}, а изменение механических свойств кристаллов определяется главным образом движением дислокаций и их взаимодействием с элементарными возбуждениями кристалла и потенциальными барьерами, создаваемыми различными дефектами структуры. Дислокации движутся со скоростями $v \geq 10^{-2}c$ (где c − скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле) и преодолевают барьеры без помощи тепловых флуктуаций. Это так называемая динамическая область скоростей. Механизм диссипации при динамическом взаимодействии со структурными дефектами заключается в необратимом переходе кинетической энергии дислокации в энергию ее изгибных колебаний в плоскости скольжения. Данный механизм весьма чувствителен к виду спектра дислокационных колебаний. При высокоскоростной деформации плотность дислокаций достигает больших значений, а взаимодействие дислокаций между собой приводит к перестройке дислокационного спектра, что, в свою очередь, облегчает преодоление дислокациями различных точечных дефектов (примесей, междоузельных атомов, вакансий).

Основываясь на подходе, который использован в развитой нами теории динамического взаимодействия структурных дефектов, можем записать выражение для силы динамического торможения движущейся краевой дислокации точечными дефектами в следующем виде:

$$F_d = \frac{nb^2}{8\pi^2 m}\int \mathrm{d}^3 q\,|q_x|\left|\sigma_{xy}^d(\mathbf{q})\right|^2 \delta\left(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_z)\right), \tag{1}$$

где n – объемная концентрация дефектов, b – модуль вектора Бюргерса, m – масса единицы длины дислокации, $\sigma_{xy}^d(\mathbf{q})$ – фурье-образ соответствующей компоненты тензора напряжений, создаваемых дефектом, $\omega(q_z)$ – спектр дислокационных колебаний. Величина этой силы определяет динамический предел текучести и другие макроскопические характеристики кристалла.

Поскольку исследуемый механизм диссипации реализуется благодаря возбуждению колебаний дислокации, он оказывается весьма чувствительным к виду дислокационного колебательного спектра. Эффективность данного механизма зависит как от наличия щели в этом спектре, так и от ее величины. Наличие спектральной щели означает, что дислокация совершает колебания, находясь в параболической потенциальной яме. Задачи о колебаниях дислокации в подобной яме, в частности в рельефе Пайерлса, рассматривались и другими авторами. Однако в рамках развитой нами теории решаются задачи о движении дислокации, совершающей колебания в потенциальной яме, перемещающейся по кристаллу вместе с ней. Такая яма может возникнуть в результате коллективного взаимодействия точечных дефектов с движущейся дислокацией, коллективного взаимодействия дислокаций движущегося ансамбля с каждой отдельной дислокацией, магнитоупругого взаимодействия дислокации с магнитной подсистемой кристалла, действия сил изображения на дислокацию, скользящую в приповерхностном слое. В перечисленных случаях спектр дислокационных колебаний имеет вид

$$\omega^2\left(q_z\right) = c^2 q_z^2 + \Delta^2 . \tag{2}$$

Здесь c – скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле, Δ – спектральная щель, которая может быть описана приближенным выражением

$$\Delta = \frac{c}{L} , \tag{3}$$

где L – характерный масштаб взаимодействия, вносящего главный вклад в формирование щели. Именно величина этой щели определяет глубину параболической потенциальной ямы, в которой колеблется скользящая дислокация.

При ударно-волновом воздействии на кристалл, в частности при использовании мощных лазерных импульсов, при деформации твердых тел методом динамического канально-углового прессования, плотность подвижных дислокаций возрастает до значений ρ = 10^{14}–10^{15} m^{-2}. При этом главный вклад в формирование щели в колебательном спектре вносит коллективное взаимодействие дислокаций ансамбля с каждой дислокацией, а сама щель определяется выражением

$$\Delta_{\text{dis}} = \pi b \sqrt{\frac{M\rho}{3m}} \approx c\sqrt{\rho} = c/l_{\text{dis}} , \tag{4}$$

где $M = \dfrac{\mu}{2\pi\left(1-\gamma\right)}$ (μ – модуль сдвига, γ – коэффициент Пуассона), l_{dis} – среднее расстояние между дислокациями. Выражение для вклада упругих точечных дефектов в величину динамического предела текучести в этом случае имеет вид

$$\tau_d = G\frac{n_d\dot{\varepsilon}}{\rho^2} , \tag{5}$$

где G – коэффициент, зависящий от упругих модулей кристалла, n_d – безразмерная концентрация точечных дефектов, $\dot{\varepsilon}$ – скорость пластической деформации.

Весьма важным как с научной, так и с практической точки зрения является исследование высокоскоростной деформации состаренных сплавов, в том числе алюминиевых, которые являются важными конструкционными материалами для авиации и космонавтики. При старении алюминиево-медного сплава в нем образуются зоны Гинье–Престона – дискообразные дефекты толщиной от одного до нескольких атомных слоев и радиусом от нескольких до десятков нанометров. Препятствуя движению дислокаций, они способствуют повышению прочности сплава. Возрастание плотности подвижных дислокаций при высокоскоростном деформировании состаренных металлов приводит к возникновению эффекта сухого трения при их динамическом взаимодействии с зонами Гинье–Престона, в результате чего увеличивается динамический предел текучести сплава.

Эффект сухого трения должен наблюдаться при скоростях, не превышающих некоторое критическое значение [11]:

$$v < v_L = c\sqrt{\rho b^2\left(1+\sqrt{n_d / n_1}\right)}, \quad n_1 = \left(\frac{\rho b^2}{\chi}\right)^2. \tag{6}$$

После выполнения необходимых вычислений выражение для силы торможения дислокации зонами Гинье–Престона приобретает вид

$$F_{\mathrm{G}} = \frac{n_{\mathrm{G}}\mu b_0^2 R}{\sqrt{\rho\left(1+\sqrt{n_d / n_1}\right)}}. \tag{7}$$

Здесь n_{G} – объемная концентрация зон Гинье–Престона.

Аналогичным образом можем получить выражение для силы динамического торможения дислокации атомами второго компонента

$$F_d = \frac{n_d \mu\chi^2}{b\rho\left(1+\sqrt{n_d / n_1}\right)}\frac{v}{c}. \tag{8}$$

Выполним численные оценки. Для значений $\rho = 10^{15}$ m^{-2}, $b = 3\cdot10^{-10}$ m, $c = 3\cdot10^3$ m/s, $a = 100b$ имеем $v_L \approx c$, для $a = 10b$ – $v_L \approx 10^{-1}$ c. Эти значения попадают в исследуемый нами динамический интервал скоростей.

Зная силу динамического торможения дислокации, можем получить выражение для динамического предела текучести бинарных сплавов [11]:

$$\tau = \frac{\eta}{\sqrt{\left(1+\sqrt{n_d / n_1}\right)}} + \frac{\beta n_d}{\left(1+\sqrt{n_d / n_1}\right)} + \lambda. \tag{9}$$

Здесь введены обозначения

$$\beta = \frac{\mu\chi^2\dot{\varepsilon}}{\rho^2 b^3 c}, \quad \eta = \frac{n_{\mathrm{G}}\mu b_0 R}{\sqrt{\rho}}, \quad \beta = \frac{B\dot{\varepsilon}}{\rho b c}. \tag{10}$$

Динамический предел текучести является немонотонной функцией концентрации атомов второго компонента и имеет максимум при $n_d = n_1$ и минимум при $n_d = n_2$,

$$n_2 = \sqrt[3]{\left(\frac{n_G b^3 R \rho c}{\dot{\varepsilon}\chi^{3/2}}\right)^4}\,. \qquad (11)$$

Максимум соответствует переходу от доминирующего влияния коллективного взаимодействия дислокаций на формирование спектральной щели к доминированию влияния коллективного взаимодействия атомов второго компонента. В точке минимума реализуется переход от доминирования торможения дислокации зонами Гинье–Престона к доминированию торможения атомами второго компонента.

Выполним численные оценки. Для значений $b = 4\cdot10^{-10}$ m, $\gamma = 0.3$, $\chi = 10^{-1}$, $R = 10b$, $n_G = 10^{23}$–10^{24} m^{-3}, $\rho = 6\cdot10^{15}$ m^{-2}, $c = 3\cdot10^3$ m/s, $\dot{\varepsilon} = 10^6$ s^{-1} имеем $n_1 = 10^{-3}$–10^{-4} и $n_2 = 10^{-1}$–10^{-2}.

С ростом концентрации зон Гинье–Престона положение минимума смещается в сторону больших значений концентрации атомов второго компонента, положение максимума при этом не изменяется. Концентрационные зависимости такого типа наблюдались экспериментально авторами [13].

Развитая нами теория динамического взаимодействия структурных дефектов позволяет учесть влияние сил изображения на движение дислокаций в приповерхностной области нанометровых размеров. При движении дислокаций параллельно свободной поверхности кристалла или границе зерен поликристалла сила изображения, действующая на краевую дислокацию в целом, равна нулю. Однако эта сила оказывает существенное воздействие на спектр дислокационных колебаний, поскольку задача о движении дислокации параллельно поверхности эквивалентна задаче о движении пары дислокаций – самой дислокации и ее изображения. Это значит, что такая дислокация перемещается по кристаллу, находясь в параболической потенциальной яме, созданной действием сил изображения и перемещающейся вместе с дислокацией. В результате в спектре дислокационных колебаний возникает щель, величина которой сильно зависит от расстояния до поверхности и определяется следующим выражением:

$$\Delta = \frac{b}{L}\sqrt{\frac{Mb}{2m}} \approx \frac{c}{L}\,. \qquad (12)$$

Воспользовавшись результатами теории динамического взаимодействия, получим аналитическое выражение для силы динамического торможения дислокаций точечными дефектами в приповерхностной области

$$F_d = \mu b n_0 \varepsilon^2 \frac{v}{c}\left(\frac{L}{b}\right)^2. \qquad (13)$$

Численные оценки показывают, что в приповерхностной области сила торможения может быть на один-два порядка меньше, чем в областях, удаленных от поверхности.

Выполним численные оценки глубины приповерхностного слоя, в пределах которого поверхность существенно влияет на динамическое взаимодействие дислокаций с точечными дефектами. Для типичных значений $c = 3\cdot 10^3$ m/s, $b = 3\cdot 10^{-10}$ m, $n_{0V} \approx 10^{-2}$–10^{-6}, $v \approx (10^{-2}$–$10^{-1})c$ получим, что толщина оцениваемого слоя может составлять от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров.

Как было отмечено выше, изучаемый механизм диссипации заключается в необратимом переходе кинетической энергии дислокации, совершающей надбарьерное скольжение, в энергию ее изгибных колебаний [10]. Эффективность действия такого механизма была подтверждена авторами работы [14], которые теоретически исследовали движение дислокации в динамической области скоростей и доказали, что в результате взаимодействия с точечными дефектами она испытывает сильное возбуждение собственных колебаний. Авторы приведенной работы учли случайный характер передачи движущейся дислокации импульса отдельными примесными атомами и вычислили корреляционную функцию $G(\tau) = \langle w(z,t)\, w(z,t+\tau)\rangle$, где функция $w(z,t)$ описывает смещение единичного участка дислокации при ее колебаниях в процессе скольжения по кристаллу. Величина $G(\tau)$ может быть определена экспериментально через пропорциональную ей корреляционную функцию неупругого рассеяния света $\langle E(t)E(t+\tau)\rangle$, которую можно измерить с помощью спектроскопии оптического смещения.

Упомянутый экспериментальный метод позволяет измерить флуктуации поля через флуктуации тока за времена, меньшие характерного периода колебаний дислокации, благодаря чему значительно расширяются возможности традиционных оптических методов, широко используемых при экспериментальном исследовании дислокационных структур. Согласно оценкам авторов [14] амплитуда раскачки дислокации может на несколько порядков превзойти амплитуду тепловых колебаний, при этом раскачка собственных колебаний происходит тем эффективнее, чем большее искажение вносят точечные дефекты в решетку кристалла, т.е. возрастает с увеличением параметра несоответствия.

Таким образом, теория динамического взаимодействия позволяет в рамках единого подхода решать широкий круг задач дислокационной динамики, а полученные результаты могут быть полезны при анализе высокоскоростной деформации различных функциональных материалов, прежде всего металлов и сплавов.

1. *J. Lee, D. Veysset, J. Singer, M. Retsch, G. Saini, T. Pezeril, K. Nelson*, *E. Thomas*, Nature Communications **3**, 1164 (2012).
2. *D. Tramontina, E. Bringa, P. Erhart, J. Hawreliak, T. Germann, R. Ravelo, A. Higginbotham, M. Suggit, J. Wark, N. Park, A. Stukowski, Y. Tang*, High Energy Density Physics **10**, 9 (2014).
3. *D. Batani*, EPL **114**, 65001 (2016).
4. *В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом*, УФН **115**, 3 (1975).

5. *D. Batani, H. Stabile, A. Ravasio, G. Lucchini, F. Strati, T. Desai, J. Ullschmied, E. Krousky, J. Skala, L. Juha, B. Kralikova, M. Pfeifer, Ch. Kadlec, T. Mocek, A. Präg, H. Nishimura, Y. Ochi*, Phys. Rev. **E68**, 067403 (2003).
6. *Ф.Х. Мирзоев, В.Я. Панченко, Л.А. Шелепин*, УФН **166**, 3 (1996).
7. *Y. Wang, Z.-K. Liu, L.-Q. Chen, L. Burakovsky, D.L. Preston, W. Luo, B. Johansson, R. Ahuja*, Phys. Rev. **B71**, 054110 (2005).
8. *D. Batani, F. Strati, H. Stabile, M. Tomasini, G. Lucchini, A. Ravasio, M. Koenig, A. Benuzzi-Mounaix, H. Nishimura, Y. Ochi, J. Ullschmied, J. Skala, B. Kralikova, M. Pfeifer, Ch. Kadlec, T. Mocek, A. Präg, T. Hall, P. Milani, E. Barborini, P. Piseri*, Phys. Rev. Lett. **92**, 065503 (2004).
9. *V.V. Malashenko*, Physica B: Phys. Cond. Mat. **404**, 3890 (2009).
10. *В.Н. Варюхин, В.В. Малашенко*, Известия РАН. Серия физическая **82**, 1213 (2018).
11. *В.В. Малашенко*, ФТТ **61**, 1845 (2019).
12. *В.В. Малашенко*, Письма в ЖТФ **45**, № 12, 6 (2019).
13. *D.G. Morris, M.A. Muñoz-Morris, L.M. Requejo*, Mater. Sci. Eng. **A460–461**, 163 (2007).
14. *Г.А. Левачева, Э.А. Маныкин, П.П. Полуэктов*, ФТТ **27**, 3709 (1985).

V.V. Malashenko, T.I. Malashenko, A.P. Lukyanchenko

DISLOCATION DYNAMICS IN HIGH-RATE PLASTIC DEFORMATION OF FUNCTIONAL MATERIALS

The fundamental provisions of the theory of dynamic interaction of structural defects are outlined. The solutions of various problems of dislocation dynamics are presented. Numerical esti-mates show the importance of the studied dissipation mechanism. The theory of dynamic interaction of structural defects allows explanation of a number of experimental results.

Keywords: structural defects, dislocations, strength, plasticity, high-rate plastic deformation