PACS: 61.72.Lk, 62.20.Fe

В.В. Токий

ДИНАМИЧЕСКОЕ ФОРМОИЗМЕНЕНИЕ

Донбасская государственная академия строительства и архитектуры
86123, г. Макеевка, ул. Державина, 2

Обсуждаются актуальные проблемы воздействия высокого давления на дислокационные механизмы пластической деформации. Исследовано влияние размеров кристалла на сверхзвуковое динамическое зарождение дислокаций. Изучена зависимость энергетического барьера зарождения винтовой дислокации на свободной поверхности от скорости зарождения для кристаллов различных размеров. Установлено наличие минимума на такой зависимости. В первом приближении найдены аналитические выражения для положения этого минимума, величины минимального барьера и его зависимость от размера кристалла. Получено уравнение для определения критического размера кристалла, меньше которого сверхзвуковое пластическое формоизменение будет энергетически выгоднее дозвукового.

Влияние термодинамических параметров (температуры, давления и внешних сдвиговых напряжений) вообще и высоких всесторонних сжатий в частности на изменение формы кристалла, не связанное с возникновением напряжений (т.е. на механизм пластической деформации), всегда представляло интерес и с теоретической, фундаментальной, и с прикладной, технологической точек зрения. Как известно [1], физический механизм пластической деформации представляет собой движение дислокаций. В результате прохождения дислокации через весь кристалл часть последнего оказывается сдвинутой на один период решетки; поскольку решетка в результате остается правильной, то кристалл остается ненапряженным.

Влияние давления на пластическую деформацию рассматривалось в рамках дислокационных механизмов. В частности, было показано [2], что высокое гидростатическое давление затрудняет расширение дислокационной петли, преодоление дислокацией потенциального барьера, движение ступенек и пересечение леса дислокаций. Поперечное скольжение и двойное поперечное скольжение, играющее определяющую роль при размножении дислокаций, стимулируются высоким гидростатическим давлением [3].

Однако вопрос термодинамики зарождения дислокаций продолжает оставаться открытым ввиду огромных величин теоретически рассчитанного энергетического барьера (~ 250 eV), обусловленного дальнодействующим, упругим взаимодействием дислокации с поверхностью [2]. Этот барьер может исчезать только при давлениях порядка теоретического предела прочности, что противоречит экспериментальным данным. Вот почему классическая активационно-энергетическая проблема продолжает оставаться в центре внимания создателей дислокационной теории [4].

В [5] в рамках континуальной теории рассмотрено динамическое зарождение винтовой дислокации на свободной поверхности. Получены точные аналитические выражения для полей смещений и их скоростей, а также полей напряжений. В [6] найдено выражение для силы, действующей на единицу длины зарождающейся дислокации с учетом конечности ширины последней, и дисперсии упругих свойств. Определена энергия, излучаемая при зарождении дислокаций, и показано, что при дозвуковых скоростях зарождения энергетический барьер зарождения дислокаций растет с увеличением скорости. При сверхзвуковых скоростях движения вклад упругого взаимодействия в этот барьер снижается.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния размеров кристалла на сверхзвуковое динамическое зарождение дислокаций. Актуальность такого рассмотрения возрастает в связи с обнаружением в последнее время размерных эффектов в формировании механических и физических свойств нанокристаллических материалов [7].

Движение дислокаций сопровождается помимо изменения формы кристалла также и изменением упругой деформации, вызывающей напряжения, которые остаются в результате только при изменении количества (плотности) дислокаций в кристалле. Изменение полной упругой энергии кристалла определяется выражением

$$\Delta E = \int \mathrm{d}^3 r \frac{1}{2}\left(\sigma_{ik} u_{ik} + \rho v_i^2\right). \tag{1}$$

Подставляя в (1) выражения для полей смещений u_i, скоростей v_i и напряжений σ_{ik}, из [6] получаем величину изменения полной упругой энергии кристалла при дозвуковом зарождении винтовой дислокации на свободной поверхности

$$\Delta E = \frac{\mu b^2}{4\pi c} \frac{V^2 + c^2}{\sqrt{c^2 - V^2}} \ln \frac{he^2}{b} \tag{2}$$

и при сверхзвуковом –

$$\Delta E = \frac{\mu b^2}{4}\left[\frac{hV}{V-c}\left(V - \sqrt{V^2 - c^2}\right) + \frac{2h^2\omega_m}{\pi c V}\sqrt{V^2 - c^2}\right], \tag{3}$$

где μ – модуль сдвига; h – линейный размер кристалла; b – вектор Бюргерса дислокации; V – скорость движения дислокации; c – поперечная скорость звука; ω_m – ширина полосы пропускания дебаевского квазиконтинуума. Последнее слагаемое описывает энергию черенковского излучения, которая определяется дисперсией упругих свойств кристалла. При получении выражения (3) в рамках модели дебаевского квазиконтинуума, как и в [6], считали, что механизмы, обусловливающие дисперсию упругих модулей, допускают пренебрежение пространственной дисперсией.

Анализ зависимости энергетического барьера зарождения винтовой дислокации на свободной поверхности от скорости зарождения для кристаллов различных размеров позволяет установить наличие минимума на данной зависимости.

Аналитическое выражение для положения этого минимума в первом прибли-

жении по параметру $c/(h\omega_m)$ имеет вид

$$V_m = c\left[1+\left(\frac{\pi c}{\sqrt{2}h\omega_m}\right)^{2/3}\right]. \tag{4}$$

Подставляя (4) в (3), получаем величину минимального энергетического барьера при сверхзвуковом зарождении винтовой дислокации и его зависимость от размера кристалла:

$$\Delta E_m = \frac{3\mu b^2 h}{4}\left(\frac{\sqrt{2}h\omega_m}{\pi c}\right)^{2/3}. \tag{5}$$

Сравнивая полученное выражение с величиной энергетического барьера при дозвуковом зарождении дислокации, видим, что при больших размерах кристалла барьер сверхзвукового зарождения больше. Однако с уменьшением размера кристалла становится очевидным преимущество сверхзвукового формоизменения кристалла. Приравнивая барьеры дозвукового и сверхзвукового зарождения, получаем уравнение

$$3\left(\frac{\sqrt{2}h_k\omega_m}{\pi c}\right)^{2/3} = \ln\left(\frac{h_k e^2}{b}\right). \tag{6}$$

Оно позволяет определить критический размер кристалла h_k, меньше которого сверхзвуковое пластическое формоизменение будет энергетически выгоднее дозвукового.

Таким образом, можно ожидать качественных эффектов в процессах формоизменения не только в нанокристаллических и аморфных материалах, но и в приповерхностных нанослоях массивных образцов. Поскольку вычисления велись на основе теории упругости, можно ожидать, что полученные результаты окажутся правильными по крайней мере для той части энергии зарождения, которая обусловлена взаимодействием атомов среды на расстояниях, превышающих размер параметра кристаллической решетки (упругим взаимодействием), и является превалирующей при квазистатическом зарождении дислокации.

1. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*, Теория упругости, Наука, Москва (1965).
2. *В.В. Токий*, Теоретические исследования дислокаций при высоких гидростатических давлениях, Дисс. д-ра физ.-мат. наук, ДонФТИ, Донецк (1982).
3. *V.V. Tokii*, Phys. Stat. Sol. (a) **44**, 767 (1977).
4. *J.W. Cahn, F.R.N. Nabarro*, The Activation Volume For Shear, European Research Conference on Plasticity of Materials, Italy, 16-21 September (2000), p. 24.
5. *В.В. Токий*, ДАН СССР **258**, 861 (1981).
6. *В.В. Токий*, Препринт ДонФТИ-81-26, Донецк (1981).
7. *Р.А. Андриевский, А.М. Глезер*, ФММ **88**, № 1, 50 (1999); **89**, № 1, 91 (2000).

V.V. Tokii

DYNAMICAL SHAPING

In the present work the actual problems of action of high pressure on dislocation mechanism of plastic strain are considered. The influence of crystal sizes on supersonic dynamic nucleation of dislocations is studied. The dependence of energy barrier of nucleation of a screw dislocation on a free surface on the velocity of nucleation for chips of different crystal sizes is investigated. The presence of a minimum on such dependence is established. The analytical expressions for a position of this minimum, magnitudes of a minimum barrier and its dependence on a crystal size are as a first approximation defined. The equation for definition of a critical size of a crystal is obtained. If crystal size is smaller, then supersonic plastic shaping will be energetically more preferable than subsonic one.