

УДК 539.37

С.Н. КОЛУПАЕВА*, Ю.П. ПЕТЕЛИНА**, К.А. ПОЛОСУХИН*, А.Е. ПЕТЕЛИН**

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ВИНТОВОЙ ДИСЛОКАЦИИ В МЕДИ¹

Записана модификация математической модели формирования зоны кристаллографического сдвига, в которой помимо силы Пича – Келлера, решеточного, примесного и дислокационного трения, линейного натяжения, вязкого торможения и интенсивности генерации точечных дефектов за порогами на дислокации дополнительно учтена сила упругого взаимодействия между всеми дислокациями формирующегося дислокационного скопления. С использованием представленной модели проведено исследование влияния плотности дислокаций на временные характеристики формирования дислокационной петли в меди.

Ключевые слова: упругое взаимодействие дислокаций, кристаллографическое скольжение, медь, зона сдвига, винтовая дислокация.

Введение

Определяющим структурным элементом кристаллографического скольжения, процессы которого развиваются на различных структурных и масштабных уровнях, можно считать зону сдвига, возникновение которой связано с потерей устойчивости дислокационной конфигурации, способной действовать как источник. Деформация скольжения состоит из элементарных кристаллографических скольжений, которые, как правило, имеют размеры в реальных кристаллах от десятков до сотен микрометров. Обычно это величины много меньшие, чем размеры деформируемого кристалла. Макроскопическое формоизменение кристалла связано с распространением большого числа элементарных скольжений по различным кристаллографическим плоскостям и направлениям. В процессе распространения элементарного скольжения расширяющаяся замкнутая дислокация, ограничивающая область скольжения, пересекает десятки тысяч дислокаций других систем скольжения, в результате чего на ней возникают дефекты различного типа.

Математическая модель

Для исследования динамики формирования зоны кристаллографического сдвига создана математическая модель [1], в которой учтена сила Пича – Келлера, решеточное, примесное и дислокационное трение, линейное натяжение, вязкое торможение, интенсивность генерации точечных дефектов за порогами на дислокации, а также сила упругого взаимодействия между всеми последовательно испущенными дислокационным источником дислокациями. Математическая модель формирования зоны сдвига записана в следующем виде [1]:

$$\begin{cases} \frac{d\varepsilon_k^{(i)}}{dt} = \left((\tau - \tau_f - \tau_d)b - \frac{\mu_0 + \varepsilon_k^{(i)}}{r_i} - \tau_j^{(i)}b + \sum_{k \neq i} \tau_{i,k}b - Bv_i \right) v_i, & i = \overline{1, n}, \\ \frac{dr_i}{dt} = v_i, & i = \overline{1, n}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь r_i и $\varepsilon_k^{(i)}$ – текущие радиус и кинетическая энергия единицы длины i -й дислокационной петли; t – текущее время формирования зоны кристаллографического сдвига; τ – действующее на дислокационный источник напряжение; τ_f – напряжение решеточного и примесного трения; $\tau_d = \alpha G b \rho^{1/2}$ – дислокационное сопротивление распространению кристаллографического скольжения; α – параметр, характеризующий интенсивность междислокационных взаимодействий [2]; G – модуль сдвига; ρ – плотность дислокаций; b – модуль вектора Бюргерса; μ_0 – линейное натяжение покоящейся дислокации; $\tau_j^{(i)}$ – интенсивность генерации точечных дефектов i -й дислокацией; $\tau_{i,j} = G b^2 (2 - \nu) / (4\pi(1 - \nu)(r_i - r_j))$ – напряжение, обусловленное упругим взаимодействием i -й

¹ Работа поддержана в рамках Программы повышения конкурентоспособности ТГУ среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

и j -й дислокаций; ν – коэффициент Пуассона; B – коэффициент вязкого торможения; $v_i = c\sqrt{1 - (\varepsilon_k^{(i)} / \varepsilon_0 + 1)^{-2}}$ – скорость движения i -й дислокации [3]; $c = \sqrt{G/d}$ – поперечная скорость звука в металле; d – плотность материала; ε_0 – энергия единицы длины покоящейся дислокации.

В математической модели (1) предполагается, что зона кристаллографического сдвига формируется в однородной изотропной среде; замкнутая дислокационная петля, испускаемая дислокационным источником, в начальной конфигурации имеет форму окружности и сохраняет её при расширении; все пороги, находящиеся на винтовых составляющих дислокационной петли, производят точечные дефекты, причём напряжение, связанное с генерацией точечных дефектов, равномерно распределено по всей длине петли; линейное натяжение дислокационной петли является постоянным.

Результаты вычислительного эксперимента

В настоящей работе представлены результаты исследования формирования зоны кристаллографического сдвига при значениях параметров математической модели, характерных для меди при комнатной температуре: $B = 2.1 \cdot 10^{-5}$ Н·с; $\nu = 0.35$; $G = 5.6 \cdot 10^{10}$ Н/м²; $b = 2.5 \cdot 10^{-10}$ м; $d = 8935$ кг/м³, – а также следующие значения параметров модели: $\tau = 15.9$ МПа; $\tau_f = 1$ МПа; $r_c = 1.89$ мкм [4–6]. Расчеты выполнены с использованием специализированного комплекса программ Dislocation Dynamics of Crystallographic Slip [7, 8]. Показано, что дислокационная петля после испускания дислокационным источником быстро набирает предельную скорость (рис. 1), что согласуется с результатами экспериментальных исследований [9]. При этом предельная скорость дислокации имеет максимальное значение для первой испущенной дислокационным источником дислокации и с увеличением номера дислокации уменьшается. Для последней испущенной дислокационным источником дислокации максимальная скорость практически на 2 порядка величины меньше скорости звука в металле.

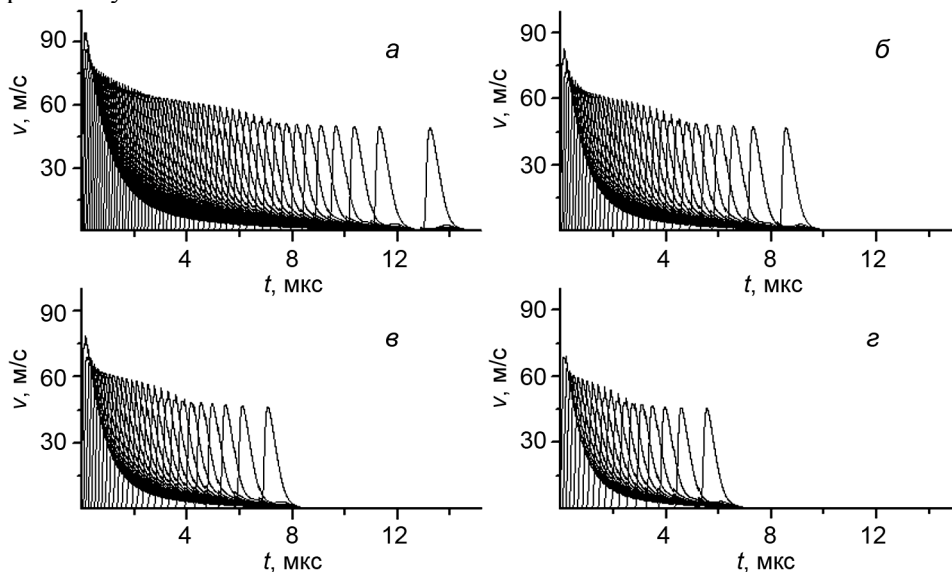


Рис. 1. Изменение скорости винтовой дислокации для различных дислокаций в зоне кристаллографического сдвига при различной плотности дислокаций в материале, м⁻²: а – $7 \cdot 10^{11}$; б – $8.5 \cdot 10^{11}$; в – $9 \cdot 10^{11}$; г – 10^{12}

Показано, что при увеличении плотности дислокаций в материале с $7 \cdot 10^{11}$ до 10^{12} (примерно на 30 %) в 3 раза (с 58 до 19 дислокаций) уменьшается количество дислокаций в зоне кристаллографического сдвига, практически в 2 раза уменьшаются время формирования зоны сдвига и максимальная скорость первой испущенной дислокационным источником дислокационной петли (рис. 1). При этом предельная скорость последней испущенной дислокационным источником дислокационной петли при увеличении плотности дислокаций в материале с $7 \cdot 10^{11}$ до 10^{12} уменьшается незначительно (не более чем на 5 %).

Установлено, что время формирования дислокационной петли при увеличении порядкового номера дислокации в скоплении нелинейно уменьшается. При уменьшении плотности дислокаций в материале время формирования i -й дислокационной петли увеличивается (рис. 2, а). Время формирования последней испущенной дислокационным источником дислокационной петли при различной плотности дислокаций в материале отличается незначительно и составляет $3 \cdot 10^{-5}$ – $4 \cdot 10^{-5}$ с.

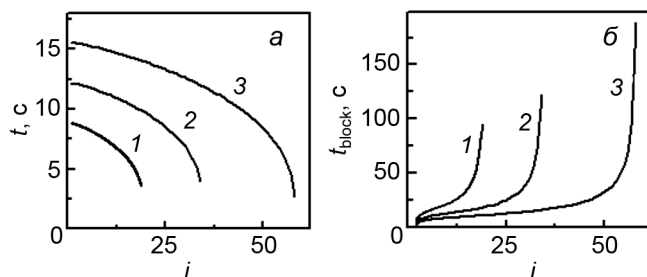


Рис. 2. Зависимость времени расширения i -й дислокационной петли (а) и времени блокировки дислокационного источника перед испусканием следующей дислокации (б) от порядкового номера дислокации в дислокационном скоплении при различной плотности дислокаций в материале, м^{-2} : кр. 1 – 10^{12} , кр. 2 – $8.5 \cdot 10^{11}$, кр. 3 – $7 \cdot 10^{11}$

Время блокировки дислокационного источника перед испусканием следующей дислокации нелинейно увеличивается при увеличении количества испущенных дислокаций (рис. 2, б). Время блокировки источника между испусканием первой и второй дислокации примерно на 2 порядка величины меньше, чем между испусканием предпоследней и последней дислокации.

Заметим, что описанное выше исследование проведено для винтовой составляющей дислокационной петли в предположении, что в начальной конфигурации петля имеет форму окружности и сохраняет ее во время расширения.

Выводы

Таким образом с использованием представленной в работе математической модели показана существенная зависимость динамических и временных характеристик винтовой дислокации от плотности дислокаций в меди. Так, при увеличении плотности дислокаций в материале на 30 % (с $7 \cdot 10^{11}$ до 10^{12} м^{-2}) практически в 2 раза уменьшаются время формирования зоны сдвига и максимальная скорость первой испущенной дислокационным источником дислокационной петли, в 3 раза уменьшается количество дислокаций в зоне кристаллографического сдвига, примерно в 2 раза увеличивается время формирования зоны кристаллографического сдвига. Для дальнейшего развития исследований представляет интерес учесть в вычислительном эксперименте ориентационную зависимость сил сопротивления расширению дислокационной петли [10].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Петелин А.Е., Самохина С.И., Колупаева С.Н. // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 8. – С. 95–100.
2. Колупаева С.Н., Старенченко В.А., Попов Л.Е. Неустойчивости пластической деформации кристаллов. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 1994. – 301 с.
3. Судзуки Т., Ёсинга Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность – М.: Мир, 1989. – 296 с.
4. Фридель Ж. Дислокации. – М.: Мир, 1967. – 644 с.
5. Parameswaran V.R. and Weertman J. // Met. Trans. – 1971. – V. 2. – No. 4. – P. 1233–1243.
6. Hikata A. and Elbaum C. // Phys. Rev. Lett. – 1967. – V. 18. – P. 750–752.
7. Петелин А.Е., Колупаева С.Н. // Известия Томского политехнического университета. – 2010. – Т. 316. – № 5. – С. 141–146.
8. Колупаева С.Н., Петелин А.Е. // Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета. – 2011. – № 3. – С. 159–163.
9. Гилман Дж.Д. Микропластичность. – М.: Металлургия, 1972. – С. 18–36.
10. Колупаева С.Н., Петелин А.Е. // Изв. вузов. Физика. – 2014. – Т. 57. – № 2. – С. 15–20.

*Томский государственный архитектурно-строительный университет,
г. Томск, Россия

Поступила в редакцию 16.01.15.

**Национальный исследовательский Томский государственный университет,
г. Томск, Россия
E-mail: ksn58@yandex.ru, aepetelin@gmail.com

Колупаева Светлана Николаевна, д.ф.-м.н., профессор;
Петелина Юлия Павловна, ассистент;
Полосухин Константин Алексеевич, студент;
Петелин Александр Евгеньевич, к.ф.-м.н., ст. преподаватель.