

УДК 539.375

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ И ОЦЕНКА ЯДРА ДИСЛОКАЦИИ ДЛЯ ПЛОТНОУПАКОВАННОГО СЛОЯ АТОМОВ

В. М. Корнев, В. Д. Кургузов

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Получено модельное описание узких ядер дислокаций. Выявлена дискретная структура ядра дислокации в моделях Френкеля — Конторовой и Пайерлса. Предложена схема ядра дислокации, которая хорошо согласуется с представлениями механики деформируемого твердого тела.

**Введение.** Известно, что напряженно-деформированное состояние, порождаемое дислокациями, не описывается одномерными моделями. Поля напряжений, смещений и деформаций хорошо описываются континуальной теорией упругости [1, 2] только на значительном удалении от центра дислокации. Приведем упругое поле напряжений краевой дислокации в полярных координатах  $(r, \theta)$  [2]:

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -\frac{D \sin \theta}{r}, \quad \sigma_{r\theta} = \frac{D \cos \theta}{r}, \quad D = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}. \quad (1)$$

Здесь начало полярной системы координат  $(r, \theta)$  совпадает с центром краевой дислокации;  $\mu$  — модуль сдвига;  $\nu$  — коэффициент Пуассона;  $b$  — абсолютная величина вектора Бюргерса краевой дислокации. Поле напряжений (1) имеет вид  $f(\theta)/r$  и не обладает радиальной симметрией.

Для описания напряженно-деформированного состояния в ядре дислокации необходимо применять дискретную модель, учитывающую строение кристаллической решетки, а при конкретных вычислениях использовать потенциалы межатомного взаимодействия, имеющие четкий физический смысл, и вычислительные процедуры, позволяющие решать задачи при наличии сильных физической и геометрической нелинейностей.

В [1, с. 184] отмечается, что “большинство особенностей поведения дислокаций, определяющих механические свойства кристаллов, ... существенно зависит от структуры ядра дислокации”. В настоящее время общепринятым представлением о механизме пластического деформирования при наличии дислокации является следующее [1, 2]: чем шире ядро дислокации, тем легче при соответствующем нагружении осуществляется пластическое скольжение в кристалле, имеющем дислокацию.

**Дискретная модель ядра дислокации.** В полном объеме изучить напряженно-деформированное состояние краевой дислокации достаточно сложно, кроме того, возникают определенные трудности при интерпретации полученных численных результатов. Поэтому остановимся на простейших моделях краевых дислокаций. Исследуются двумерные модели дислокаций Френкеля — Конторовой [3] и Пайерлса [4].

*Модель Френкеля — Конторовой.* Рассматривается взаимодействие двух рядов атомов в плотноупакованной кристаллической решетке. Нижний ряд состоит из неподвижных

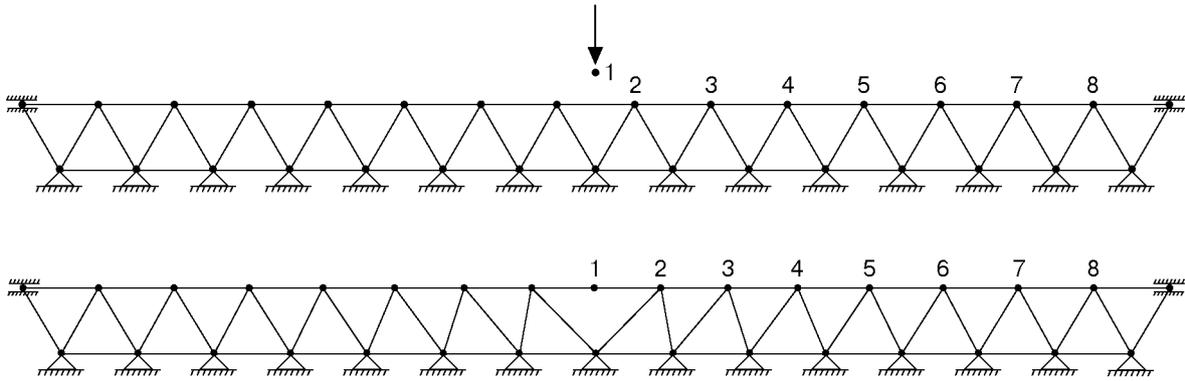


Рис. 1

атомов, закрепленных в узлах решетки, и создает периодическое силовое поле. Верхний представляет собой цепочку атомов, которые могут смещаться в горизонтальном направлении. Сначала рассматривается случай, когда атомы нижнего и верхнего рядов образуют идеальные трехатомные ячейки, затем перпендикулярно верхнему ряду внедряется одиночный атом, что приводит к смещению атомов верхнего ряда и образованию дислокации (рис. 1).

Действие межатомных сил предполагается центральным с потенциалом взаимодействия Морзе [5]

$$U(r) = D[e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2e^{-\alpha(r-r_e)}], \quad (2)$$

где  $r$  — расстояние между атомами;  $r_e$  — положение равновесия;  $D$ ,  $\alpha$  — константы. При  $r = r_e$  (равновесное состояние) центральная сила взаимодействия атомов равна нулю; при  $r < r_e$  между атомами действует сила отталкивания (отрицательная); при  $r > r_e$  — сила притяжения (положительная), которая достигает максимума  $f_m$  на некотором расстоянии  $r_m$ , так что при дальнейшем удалении атомов центральная сила их взаимодействия ослабевает и на расстоянии  $2r_e$  уменьшается на порядок по сравнению с максимальным значением. Первая производная от потенциала (2) дает выражение для центральной силы

$$f(r) = \frac{\partial U(r)}{\partial r} = 2D\alpha[e^{-\alpha(r-r_e)} - e^{-2\alpha(r-r_e)}],$$

откуда  $r_m = r_e + \ln(2/\alpha)$ ;  $f_m = D\alpha/2$ . Расчеты проводились при следующих безразмерных значениях констант:  $D = 3$ ,  $\alpha = 1,4$ ,  $r_e = 1$ .

*Численное решение задачи о деформировании атомной решетки.* Нелинейная задача о деформировании атомной решетки решается методом конечных элементов [6]. Поскольку размер конечного элемента согласован с постоянной атомной решетки, решается задача механики деформируемого твердого тела со структурой, причем взаимодействие элементов структуры определяется действующими физическими потенциалами. Характер деформирования атомной решетки близок к характеру деформирования стержневой конструкции (фермы): атомы решетки можно рассматривать как узлы фермы, а отрезки, соединяющие атомы, — как стержни с нелинейным поведением (рис. 1). На каждый находящийся в решетке атом действуют внешние силы и силы со стороны ближайших соседей. Уравнения движения атомной решетки следуют из принципа возможных перемещений: виртуальная работа внутренних сил равна виртуальной работе внешних сил и сил инерции. Для момента времени  $t$  это равенство записывается в виде

$$\sum_{k=1}^n f_k(t)\delta r_k(t) = R(t),$$

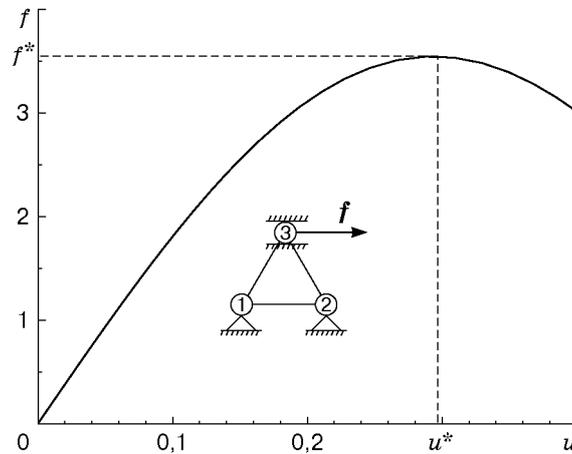


Рис. 2

где  $f_k(t)$  — центральная сила взаимодействия атомов в  $k$ -й атомной паре;  $r_k(t)$  — расстояние между атомами в  $k$ -й атомной паре;  $R(t)$  — виртуальная работа внешних сил;  $n$  — число атомов в атомной решетке. Для интегрирования уравнений движения используется пошаговая процедура [6]: равновесная конфигурация и внутренние силы атомной решетки в момент  $t$  предполагаются известными, и решается задача по определению равновесной конфигурации и внутренних сил в момент времени  $t + \Delta t$ . При достаточно малом шаге интегрирования  $\Delta t$  решение нелинейной системы уравнений сводится к решению линеаризованной системы уравнений. На каждом шаге по времени это решение уточняется с помощью итерационной процедуры Ньютона — Рафсона, затем происходит переход на следующий шаг.

В [7] получены матрицы и векторы конечного элемента атомной пары и из принципа возможных перемещений выведены линеаризованные уравнения движения атомной решетки

$$M\ddot{\mathbf{U}}(t + \Delta t) + K(t)\mathbf{U} = \mathbf{R}(t + \Delta t) - \mathbf{F}(t),$$

где  $M$  — диагональная матрица масс атомной решетки;  $\mathbf{U} = \mathbf{U}(t + \Delta t) - \mathbf{U}(t)$  — вектор приращения перемещений атомов;  $K$  — касательная матрица жесткости;  $\mathbf{R}$  — вектор внешних сил, действующих на атомы;  $\mathbf{F}$  — вектор внутренних сил. При квазистатическом деформировании инерционные члены отбрасываются. Получающиеся уравнения

$$K(t)\mathbf{U} = \mathbf{R}(t + \Delta t) - \mathbf{F}(t) \quad (3)$$

называются линеаризованными уравнениями равновесия атомной решетки.

*Деформирование трехатомной ячейки.* Идеальная трехатомная ячейка — элементарный объект, из которого построена плоская плотноупакованная кристаллическая решетка (рис. 2). На рис. 2 приведена зависимость величины внешней силы  $f$  от смещения третьего атома. При достижении максимальной нагрузки ячейка теряет устойчивость: дальнейшее деформирование происходит при уменьшающемся значении внешней силы. Максимальной нагрузке соответствует локальный максимум на кривой зависимости нагрузки от характерного перемещения. В точке локального максимума  $\det |K(t)| = 0$ . Такое деформированное состояние атомной решетки называется собственным [7].

Из-за больших смещений и поворотов физически нелинейная задача деформирования атомной решетки становится еще и геометрически нелинейной. Решения подобных задач содержат собственные состояния типа максимальной нагрузки. Основная трудность их решения состоит в том, что в качестве монотонно возрастающего параметра деформирования нельзя взять внешнюю силу, действующую на атомную решетку. Усложняет решение

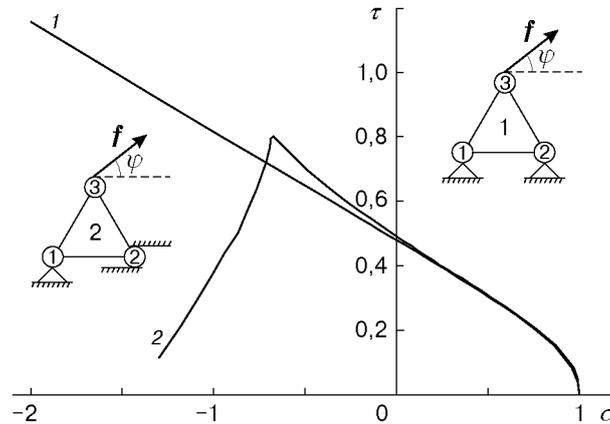


Рис. 3

также вырожденность касательной матрицы жесткости при достижении максимальной нагрузки. В этом случае итерационная процедура Ньютона — Рафсона не дает сходимости к решению задачи. Для преодоления указанных трудностей в [7] в число неизвестных вводится параметр внешней силы, а в качестве дополнительного уравнения к системе (3) задается длина дуги в  $(\mathbf{U}(t), \lambda)$ -пространстве ( $\mathbf{U}(t)$  — вектор перемещений,  $\lambda$  — параметр внешней силы).

Поведение трехатомной ячейки для различных схем закрепления и в диапазоне изменения угла наклона внешней нагрузки к горизонтальной оси  $\varphi$  от  $-\pi/2$  до  $\pi/2$  изучалось в работе [8]. На рис. 3 представлены диаграммы предельных соотношений  $\tau - \sigma$  при сложном напряженном состоянии ( $\mathbf{f} = \sigma \mathbf{i} + \tau \mathbf{j}$ ). Кривые 1, 2 соответствуют схемам деформирования 1, 2 (в схеме 1 атом 2 закреплен, в схеме 2 он может смещаться в горизонтальном направлении). Полученные кривые описывают теоретическую прочность твердого тела при различных путях нагружения и охватывают весь диапазон разрушения твердых тел от хрупкого и квазихрупкого ( $\sigma > 0$ ) до разрушения в пластической области ( $\sigma < 0$ ). На рис. 3 резкое снижение кривой 2 (она становится выпуклой вниз) левее угловой точки свидетельствует о сверхчувствительности атомной решетки к появлению вакансий.

Рассмотрим следующую схему ядра дислокации, которая хорошо согласуется с представлениями механики деформируемого твердого тела. Вне ядра дислокации смещения не превышают значений, соответствующих локальной теоретической прочности атомной решетки на сдвиг:  $u < u^*$ . Эта оценка ширины ядра дислокации отличается от общепринятой (в физике твердого тела) оценки по фиксированным смещениям в ядре дислокации  $u < b/8$  [2, с. 74–76]. При континуальном подходе существование ядра дислокации возможно только потому, что внешняя часть атомной решетки твердого тела находится в состоянии докритического деформирования. При дискретном подходе в ядре дислокации трехатомные ячейки находятся в закритическом состоянии, от опрокидывания их предохраняет противодействие со стороны трехатомных ячеек вне ядра дислокации, находящихся в докритическом состоянии.

Для определения ширины ядра дислокации решена задача о потере устойчивости трехатомной ячейки при сдвиге (см. рис. 2). Критическое значение смещения, при котором происходит потеря устойчивости, оказалось равным  $u^* = 0,296$ . Для атомов верхнего ряда, обозначенных на рис. 1 цифрами 2–8, получены следующие значения смещений:  $u_2 = 0,347$ ,  $u_3 = 0,225$ ,  $u_4 = 0,136$ ,  $u_5 = 0,078$ ,  $u_6 = 0,042$ ,  $u_7 = 0,023$ ,  $u_8 = 0,014$ . Таким образом, смещения превысили критическое значение только в узле 2. Для плотноупакованной кристаллической решетки ядро дислокации оказалось довольно узким (два межатомных расстояния). Это объясняется тем, что трехатомная ячейка до потери устойчивости обладает

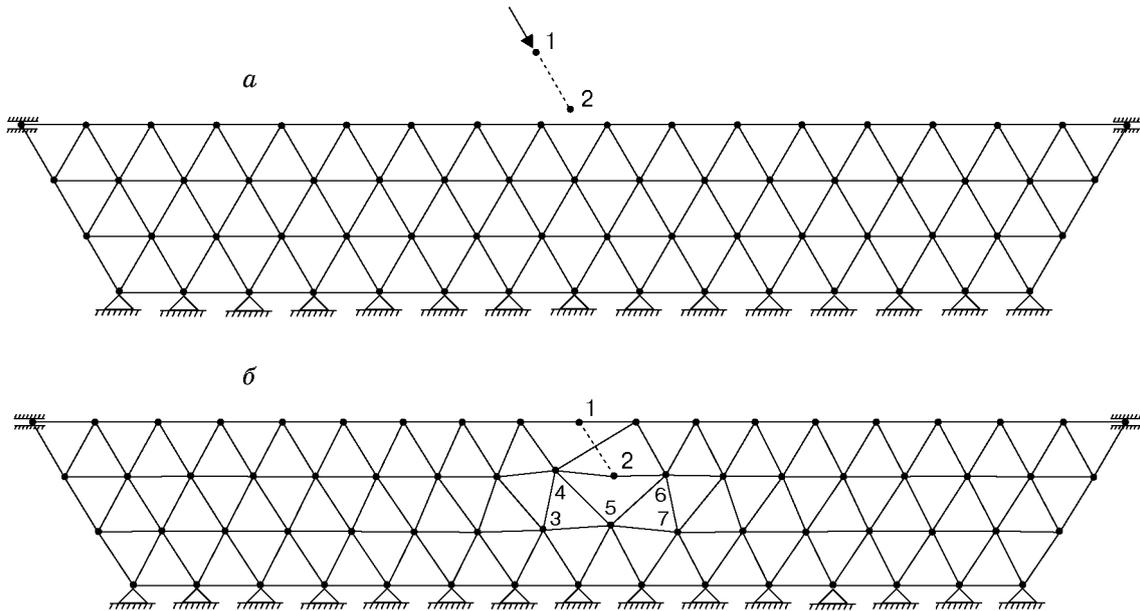


Рис. 4

повышенной жесткостью, другими словами, она имеет малую податливость при докритическом нагружении.

Таким образом, установлено, что модель Френкеля — Конторовой [3] упрощенно описывает ядро дислокации.

*Модель Пайерлса* [4]. Рассматривается взаимодействие четырех рядов атомов в плоской плотноупакованной кристаллической решетке. Нижний ряд состоит из неподвижных атомов, закрепленных в узлах решетки, верхний представляет собой цепочку атомов, которые могут смещаться в горизонтальном направлении, атомы второго и третьего рядов могут смещаться в произвольном направлении (рис. 4,а). Под углом  $60^\circ$  к верхнему ряду производится внедрение двух жесткосвязанных атомов, приводящее к смещению атомов первого и второго рядов и образованию дислокации (рис. 4,б). В отличие от одномерной модели Френкеля — Конторовой модель Пайерлса является существенно двумерной.

Для определения ширины ядра дислокации решена задача о потере устойчивости ячейки 3–4–5, деформирующейся в условиях обобщенного напряженного состояния. На рис. 5 приведена зависимость величины внешней силы от смещения атома 4. Особенностью этой

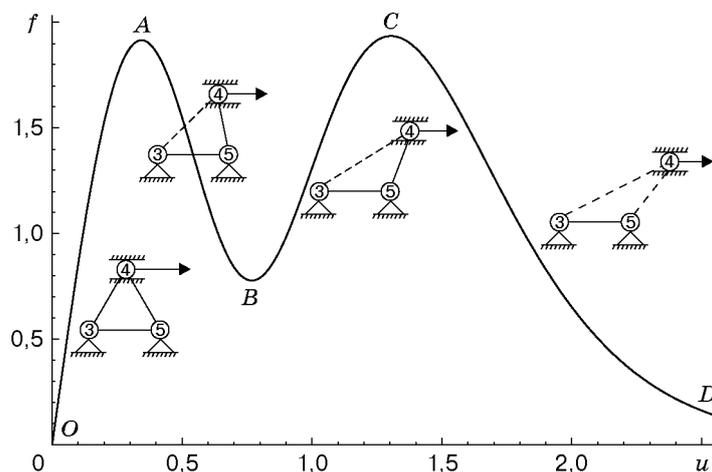


Рис. 5

зависимости является наличие двух максимумов. На участке  $OA$  ячейка находится в докритическом состоянии; на участке  $AB$  связь 3–4 находится в закритическом состоянии, между атомами 5 и 4 действует сила отталкивания (расстояние между атомами 5 и 4 меньше  $r_e$ ); на участке  $BC$  происходит обрыв связи 3–4, связь 5–4 работает в докритическом режиме; на участке  $CD$  происходит обрыв связей 3–4 и 5–4. В качестве критического значения смещения  $u^*$ , при котором происходит потеря устойчивости, примем величину смещения  $u^* = 0,342$ , соответствующую первому максимуму на рис. 5. Для четырехслойной атомной структуры (см. рис. 4, б) смещения атома 4 превысили критическое значение:  $u_4 = 0,365$ . Аналогичным анализом обнаружена потеря устойчивости ячейки 5–6–7. Во всех остальных ячейках смещения атомов не превышают критических значений. Следовательно, для модели Пайерлса ширина ядра дислокации также оказалась равной примерно двум межатомным расстояниям.

**Заключение.** Численный эксперимент показал, что существует возможность построения простой модели, описывающей распространение трещины при сдвиге, когда часть кристаллической структуры в окрестности вершины трещины находится в закритическом состоянии. Следуя идеям Леонова — Панасюка [9] и Новожилова [10] при формулировке достаточного критерия квазихрупкой прочности кристаллических тел, можно считать, что вершина трещины попадает в первую трехатомную ячейку, находящуюся в докритическом состоянии, а закритическое поведение кристаллической структуры внутри трещины моделируется соответствующим нагружением берегов трещины.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Предводителей А. А., Тяпунина Н. А., Зиненкова Г. М., Бушуева Г. В. Физика кристаллов с дефектами. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986.
2. Коттрел А. Теория дислокаций. М.: Мир, 1969.
3. Конторова Т. А., Френкель Я. И. К теории пластической деформации и двойникования. 2 // Журн. эксперим. и теорет. физики. 1938. Т. 8, вып. 12. С. 1340–1348.
4. Peierls R. The size of a dislocation // Proc. Phys. Soc. 1940. V. 52, pt 1. P. 34–37.
5. Макмиллан Н. Идеальная прочность твердых тел // Атомистика разрушения: Сб. ст. 1983–1985 гг. / Сост. А. Ю. Ишлинский. М.: Мир, 1987. С. 35–103.
6. Bathe K.-J. Finite element procedures in engineering analysis. Englewood Cliffs (New Jersey): Prentice-Hall, 1982.
7. Коробейников С. Н. Применение метода конечных элементов к решению нелинейных задач по деформированию и потере устойчивости атомных решеток. Новосибирск, 1997. (Препр. / РАН. Сиб. отд-ние. Ин-т гидродинамики; № 1-97).
8. Kornev V. M., Kurguzov V. D. A discrete-integral strength criterion for complicated stress states // Fatigue Fracture Engng Mater. Structures. 1999. V. 22, N 11. P. 989–995.
9. Леонов М. Я., Панасюк В. В. Развитие мельчайших трещин в твердом теле // Прикл. механика. 1959. Т. 5, № 4. С. 391–401.
10. Новожилов В. В. О необходимом и достаточном критерии хрупкой прочности // Прикл. математика и механика. 1969. Т. 33, вып. 2. С. 212–222.

Поступила в редакцию 1/XII 1999 г.,  
в окончательном варианте — 18/IV 2000 г.