

УДК 548.24

ДИСЛОКАЦИОННАЯ СТРУКТУРА ПОЛОС СДВИГА В МОНОКРИСТАЛЛАХ

С. П. Киселев

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,
630090 Новосибирск
E-mail: kiselev@itam.nsc.ru

Предложена математическая модель развития полосы сдвига в кристаллах, основанная на механизме двойного поперечного скольжения винтовых участков дислокаций. Получены уравнения, с использованием которых исследована устойчивость однородного распределения дислокаций. Найдено решение в виде бегущей волны, описывающей структуру полосы сдвига.

Ключевые слова: напряжения, деформация, дислокации, полоса сдвига.

Введение. Как известно, при достижении напряжением сдвига критической величины начинается пластическая деформация кристалла. Дислокационные петли начинают двигаться в плоскости скольжения и расширяться, в результате чего возникают полосы сдвига [1]. При увеличении деформации полосы сдвига могут объединяться в пачки, образуя на макроуровне полосы скольжения Людерса — Чернова [2]. Таким образом, полосы скольжения играют важную роль в процессе пластической деформации и интенсивно изучаются теоретически и экспериментально.

В работе [3] приведены экспериментальные данные по полосам сдвига в ионных (ГЦКИ) кристаллах LiF. Выбор кристалла LiF определялся тем, что на начальной стадии пластическое деформирование в нем происходит в одной плоскости скольжения, ориентированной под углом 45° к оси растяжения (сжатия). Установлено, что расширение полосы сдвига происходит вследствие двойного поперечного скольжения винтовых участков дислокаций. Деформация кристалла происходит только на фронте полосы сдвига. В результате действия внутренних напряжений от скоплений дислокаций их скорость за фронтом полосы стремится к нулю, поэтому пластическая деформация внутри полосы остается постоянной. В работах [4–6] построены математические модели, описывающие расширение полосы сдвига вследствие действия механизма двойного поперечного скольжения. В предположении, что двойное поперечное скольжение имеет стохастический характер, в [4–6] получены диффузионные уравнения типа уравнения Колмогорова — Петровского — Пискунова — Фишера для плотности дислокаций и исследованы их решения. Однако реализация подхода, предложенного в [4–6], имеет серьезные недостатки: полученные в [4] уравнения содержат отрицательные коэффициенты диффузии, что противоречит второму закону термодинамики. Использованное в [5, 6] предположение о постоянстве скорости движения дислокаций противоречит данным эксперимента о торможении дислокаций внутри полосы сдвига [3]. В настоящей работе построена математическая модель распространения поло-

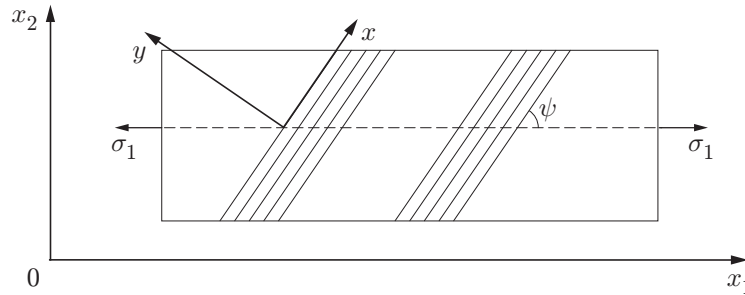


Рис. 1. Схема развития полос скольжения в плоском образце при одноосном растяжении вдоль оси x_1 (движение дислокаций — вдоль оси x , расширение полос скольжения — вдоль оси y)

сы сдвига, в которой указанные недостатки исправлены, получены решения, описывающие структуру полосы сдвига, рассмотренную в [3].

1. Вывод уравнений. Рассмотрим плоский образец, который растягивается вдоль оси x_1 под действием напряжения σ_1 . Будем считать, что движение дислокаций происходит в плоскости скольжения, наклоненной к оси x_1 на угол ψ (рис. 1). Пластическая деформация происходит вследствие движения дислокационных петель до момента их торможения на препятствиях различной природы (примеси, выделения и т. д.). Под действием локальных напряжений винтовой участок заторможенной дислокационной петли может быть выброшен в соседнюю плоскость скольжения, где возникает источник Франка — Рида, который генерирует дислокационные петли, движущиеся в параллельной плоскости скольжения. В свою очередь, дислокационная петля в исходной плоскости скольжения может обогнуть препятствие и продолжить свое движение. Время и дальность выброса винтового сегмента имеют случайный характер, поэтому процесс размножения дислокаций должен описываться интегродифференциальным кинетическим балансовым уравнением (см. [4]). Следует отметить, что если дальность выброса $h < h_0$, то за счет упругого взаимодействия выброшенного сегмента с дислокацией в исходной плоскости этот сегмент не будет двигаться и в результате выброса возникнут два краевых диполя [3]. В случае $h > h_0$ в соседней плоскости будет происходить расширение дислокационного сегмента. Поскольку концы сегмента закреплены, он является источником дислокационных петель Франка — Рида, движение которых приводит к новым актам двойного поперечного скольжения. Критическая дальность выброса сегмента определяется по формуле [3]

$$h_0 = \mu b / (8\pi(1 - \nu)(\sigma - \sigma_f)), \quad (1.1)$$

где μ — модуль сдвига; ν — коэффициент Пуассона; b — модуль вектора Бюргерса; σ — касательные напряжения; σ_f — напряжения сухого трения. Предполагается, что число отрицательных дислокаций равно числу положительных, поэтому дальнодействующие напряжения, описанные в [7], в (1.1) отсутствуют.

С учетом данных замечаний интегродифференциальное уравнение для плотности дислокаций [4] запишем в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = \int_x^\infty Q(x' - x) R(y) dx' + f', \quad Q(x' - x) = \frac{1}{\lambda_s} \exp\left(-\frac{|x' - x|}{\lambda_s}\right),$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \int_x^\infty dx' Q(x' - x) \int_{y-h_0}^{y+h_0} \frac{\rho' u'}{\lambda'_s} P(y' - y) dy' + \varphi', \quad P(y' - y) = \frac{1}{h_c} \exp\left(-\frac{|y' - y|}{h_c}\right), \quad (1.2)$$

$$R(y) = \int_{-\infty}^{y-h_0} q_{FR} \frac{\rho' u'}{\lambda'_s} P(y' - y) dy' + \int_{y+h_0}^{\infty} q_{FR} \frac{\rho' u'}{\lambda'_s} P(y' - y) dy',$$

где $u' = u(\rho')$; $\lambda'_s = \lambda_s(\rho')$; $\rho' = \rho(x', y')$; u, v — компоненты скорости движения дислокаций вдоль осей x, y (см. рис. 1); ρ, ρ_i — плотности подвижных и неподвижных дислокаций соответственно; q_{FR} — число дислокационных петель, возникающих в соседней плоскости скольжения вследствие действия механизма Франка — Рида; $Q(x' - x)$ — вероятность пробега винтовым участком дислокационной петли расстояния $x' - x$ после двойного попережного скольжения; $P(y' - y)$ — вероятность выброса винтового сегмента на расстояние $y' - y$; λ_s, h_c — характерные длины пробега и выброса винтового сегмента; f', φ' — члены, описывающие размножение подвижных и неподвижных дислокаций, которые определяются формулами [4]

$$f' = un - (\lambda_{is}^{-1} + h_i \rho_i) u \rho + \delta_f \rho_f u \rho - h_a u \rho^2, \quad \varphi' = -h_d \rho_i u \rho; \quad (1.3)$$

λ_{is} — длина пробега винтовых участков дислокационной петли до остановки на препятствиях недеформационной природы; n — концентрация источников Франка — Рида; h_i — размер краевых диполей, тормозящих подвижные дислокации; h_a — расстояние, на котором происходит аннигиляция дислокаций противоположного знака; h_d — размер краевых диполей, разрушаемых подвижными дислокациями; $\delta_f \approx 10^{-2}$ — константа. Первый член в правой части первого уравнения (1.3) описывает размножение подвижных дислокаций источниками Франка — Рида, второй — остановку дислокаций на препятствиях и диполях, третий — размножение подвижных дислокаций на дислокациях леса ρ_f , четвертый — аннигиляцию дислокаций. Во втором уравнении (1.3) член в правой части описывает разрушение краевых диполей подвижными дислокациями. В случае, когда движение дислокации имеет термоактивированный характер, скорость движения дислокации в плоскости скольжения аппроксимируется формулой [3]

$$u = u_0 \left(\frac{\sigma - \sigma_f - \sigma_\mu}{\sigma_0} \right)^m, \quad \sigma_\mu = \alpha \mu b \sqrt{\rho}, \quad (1.4)$$

где α, u_0, σ_0 — эмпирические константы; $m = H_0/(kT)$; H_0 — характерная энергия активации; k — постоянная Больцмана; T — температура; σ_μ — напряжение, обусловленное взаимодействием данной дислокации с ближайшим окружением (напряжения третьего рода). При комнатной температуре для LiF значение $m \approx 7$ [3]. Скорость пластической деформации сдвига $\dot{\epsilon}$ находится по формуле Орована — Тейлора

$$\dot{\epsilon} = b \rho u. \quad (1.5)$$

Из (1.4), (1.5) следует, что пластическое деформирование начинается при выполнении неравенства $\sigma > \sigma_*$, где $\sigma_* = \sigma_f + \sigma_\mu$ — критическое напряжение сдвига. Скорость дислокации v в направлении, перпендикулярном плоскости скольжения, определяется диффузией точечных дефектов и вакансий к дислокации [1]. В настоящей работе эти процессы не рассматриваются, поэтому полагается, что $v = 0$.

Будем считать, что в уравнениях (1.2) основной вклад в интегрирование дают точки x', y' , близкие к x, y . Тогда в (1.2) можно положить $u' \approx u(\rho)$, $\lambda'_s \approx \lambda_s(\rho)$, $\rho = \rho(x, y)$, а плотность дислокаций представить в виде

$$\rho' \approx \rho + \frac{\partial \rho}{\partial x} (x' - x) + \frac{\partial \rho}{\partial y} (y' - y) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} (x' - x)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} (y' - y)^2 + \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial y} (x' - x)(y' - y).$$

После вычисления интегралов получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= D_x \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + f, & \frac{\partial \rho_i}{\partial t} &= \varphi, \\ D_x &= q_{\text{FR}} u \lambda_s \exp(-1/q), & D_y &= q_{\text{FR}} u h_0^2 \chi(q)/(2\lambda_s), \\ \chi(q) &= (1 + 2q + 2q^2) \exp(-1/q), & q &= h_c/h_0, \\ f &= \rho u h_i (\rho_i^0 - \rho_i + n/(h_i \rho) + a\sqrt{\rho_f} - c\rho), & \varphi &= \rho u h_d (\rho_i^* - \rho_i), \\ \rho_i^* &= \frac{1}{h_d \lambda_{ie}}, & \rho_i^0 &= \frac{1}{\lambda_q h_i}, & a &= \frac{\delta f}{h_i}, & c &= \frac{h_a}{h_i}, & \frac{1}{\lambda_q} &= \frac{1}{\lambda_m} - \frac{1}{\lambda_{is}}, \\ \frac{1}{\lambda_m} &= \frac{q_{\text{FR}}}{\lambda_s} \exp\left(-\frac{1}{q}\right), & \frac{1}{\lambda_{ie}} &= \frac{1}{\lambda_s} \left(1 - \exp\left(-\frac{1}{q}\right)\right). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Во втором уравнении в (1.6) отброшены диффузионные слагаемые, так как выполняются неравенства $D_x^i/D_x \ll 1$, $D_y^i/D_y \ll 1$.

Уравнения (1.6) отличаются от соответствующих уравнений из [4] отсутствием множителя $1 - M$ в коэффициентах диффузии, где $M = -(\rho/u) \partial u / \partial \rho$. Поскольку обычно $M \gg 1$ [4], коэффициенты диффузии в [4] оказываются отрицательными, что приводит к противоречию со вторым законом термодинамики и невозможности корректной постановки задачи Коши [8].

Выясним причину появления множителя $1 - M$ в соответствующих уравнениях [4]. Как отмечено выше, при вычислении интеграла в (1.2) скорость дислокаций выбиралась в средней точке $u' \approx u(\rho)$. Для того чтобы улучшить это приближение, в [4] использовалось разложение в ряд

$$u' \approx u + \frac{\partial u}{\partial \rho} \Delta \rho + \dots = u \left(1 - M \frac{\Delta \rho}{\rho}\right) + \dots, \quad (1.7)$$

где $\Delta \rho = \rho(x', y') - \rho(x, y)$; точками обозначены члены более высокого порядка малости $O(\partial^2 u / \partial \rho^2 (\Delta \rho)^2)$. Покажем, что при данных условиях ряд (1.7) является расходящимся. Дифференцируя формулу (1.4), получим $\partial u / \partial \rho = -m \sigma_\mu / (2\rho(\sigma - \sigma_*))$. Тогда условие сходимости ряда (1.7) $M(\Delta \rho / \rho) < 1$ записывается в виде $m \sigma_\mu / (2(\sigma - \sigma_*)) |\Delta \rho / \rho| < 1$, а остаточный член имеет порядок $O(m(m-1)(\sigma_\mu / (\sigma - \sigma_*)) |\Delta \rho / \rho|^2 / 2) < 1$. Из этих неравенств следует, что ряд будет сходиться при выполнении неравенства

$$\left| \frac{\Delta \rho}{\rho} \right| < \frac{2}{m} \frac{\sigma - \sigma_*}{\sigma_\mu}. \quad (1.8)$$

В интеграл (1.2) основной вклад дают расстояния $y' - y \simeq h_0 \simeq \mu b / (\sigma - \sigma_f)$, поэтому, учитывая симметричность интегрального ядра в (1.2), получим оценку

$$\left| \frac{\Delta \rho}{\rho} \right| \simeq \frac{1}{2\rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} (y' - y)^2 \simeq \frac{1}{2\rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} \frac{\mu^2 b^2}{(\sigma - \sigma_f)^2}.$$

Отсюда следует, что при напряжениях, близких к напряжению сдвига: $\sigma \sim \sigma_* = \sigma_f + \sigma_\mu$, правая часть в (1.8) стремится к нулю, левая часть остается конечной ($\sigma - \sigma_f = \sigma_\mu > 0$) и неравенство (1.8) нарушается. В этом случае ряд (1.7) расходится и использовать его для вычисления интеграла в (1.2) невозможно.

2. Анализ устойчивости стационарного однородного распределения дислокаций. Найдем стационарное однородное решение (1.6) из первых двух уравнений системы (1.6). Полагая в них производные по времени и координатам равными нулю, $\rho_f \approx \rho$ для плотности дислокаций леса, сведем уравнения (1.6) к двум алгебраическим уравнениям

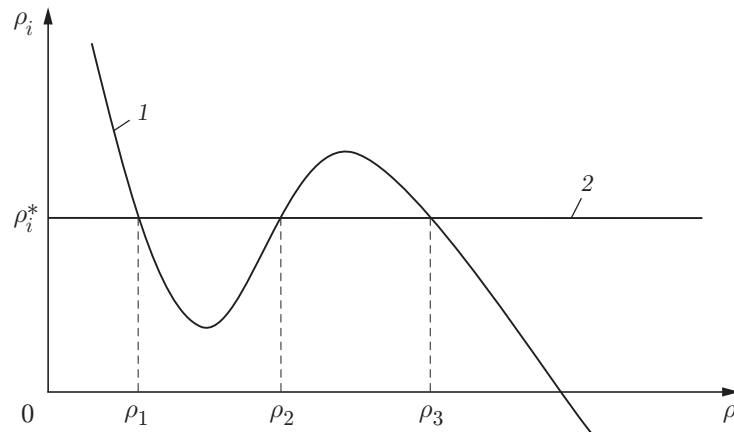


Рис. 2. Графическое решение уравнения (2.1):

1 — линия, описываемая первым уравнением в (2.1); 2 — линия, описываемая вторым уравнением в (2.1)

$$\rho(\rho_i^0 - \rho_i) + n/h_i + a\rho^{3/2} - c\rho^2 = 0, \quad \rho_i = \rho_i^*. \quad (2.1)$$

Корни этих уравнений ρ_1, ρ_2, ρ_3 (рис. 2) находятся из условия пересечения кривой 1, описываемой первым уравнением в (2.1), и прямой 2, соответствующей второму уравнению в (2.1). Приближенные значения корней системы уравнений (2.1) задаются формулами

$$\rho_1 \approx \frac{n}{h_i \Delta \rho_i}, \quad \rho_2 \approx \left(\frac{\Delta \rho_i}{a}\right)^2, \quad \rho_3 \approx \left(\frac{a}{c}\right)^2, \quad \Delta \rho_i = \rho_i^* - \rho_i^0 > 0. \quad (2.2)$$

Пусть корни (2.2) удовлетворяют неравенствам

$$\rho_1 \ll \rho_2 \ll \rho_3. \quad (2.3)$$

Тогда эти корни расположены достаточно далеко от экстремумов кривой 1 (см. рис. 2) и могут быть использованы при исследовании устойчивости решений уравнений (1.6). Неравенства (2.3) и условия положительности корней накладывают ограничения на входящие в (1.6) параметры:

$$\Delta \rho_i > 0, \quad \frac{na^2}{h_i \Delta \rho_i^3} \ll 1, \quad \frac{\Delta \rho_i c}{a^2} \ll 1. \quad (2.4)$$

При выполнении неравенств (2.4) система уравнений (1.6) является структурно устойчивой [9]. В случае, если возмущения зависят только от переменных t, x , первые два уравнения в (1.6) записываются в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D_y \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + f, \quad \frac{d\rho_i}{dt} = \varphi \quad (2.5)$$

(функции f, φ, D_y определены в (1.6)).

Вводя в уравнения (2.5) в качестве переменных малые отклонения плотности дислокаций от одного из корней (2.3) $\rho' = \rho - \rho_k, \rho'_i = \rho_i - \rho_i^*$ ($k = 1, 2, 3$), линеаризуем уравнения (2.5) в окрестности ρ_k :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho'}{\partial t} &= a_{11}\rho' + a_{12}\rho'_i + D_y \frac{\partial^2 \rho'}{\partial y^2}, & \frac{\partial \rho'_i}{\partial t} &= a_{21}\rho' + a_{22}\rho'_i, & a_{22} &= -uh_d \rho_k, \\ a_{11} &= uh_i(\rho_i^0 - \rho_i^* + (3/2)a\rho_k^{1/2} - 2c\rho_k), & a_{12} &= -uh_i \rho_k, & a_{21} &= 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Подставляя в (2.6) решение в виде $\rho' = \delta\rho \exp(pt +iky)$, $\rho'_i = \delta\rho_i \exp(pt +iky)$, получим дисперсионное уравнение $(p + D_y k^2 - a_{11})(p - a_{22}) = 0$, имеющее корни $p_1 = a_{11} - D_y k^2$, $p_2 = a_{22}$. Поскольку $a_{22} < 0$, корню $p_2 < 0$ соответствует устойчивое решение $\rho'_i \sim \exp(-|p_2|t)$. Используя неравенства (2.4), найдем значения корня p_1 в особых точках (2.2):

$$\begin{aligned} p_1 &\approx -(uh_i \Delta\rho_i + D_y k^2) && \text{при } \rho = \rho_1, \\ p_1 &\approx \frac{1}{2} uh_i \Delta\rho_i \left(1 - 4 \frac{c\Delta\rho_i}{a^2}\right) - D_y k^2 && \text{при } \rho = \rho_2, \\ p_1 &\approx -\left(uh_i \frac{a^2}{2c} + D_y k^2\right) && \text{при } \rho = \rho_3. \end{aligned}$$

В случае отсутствия диффузии ($D_y = 0$) корень $p_1 < 0$ при $\rho = \rho_1$, $\rho = \rho_3$ и $p_1 > 0$ при $\rho = \rho_2$, поэтому особые точки (ρ_1, ρ_i^*) , (ρ_3, ρ_i^*) являются устойчивыми узлами, а точка (ρ_2, ρ_i^*) — седлом (см. рис. 2). Малые возмущения в окрестности точки (ρ_2, ρ_i^*) будут экспоненциально нарастать: $\rho' \sim \exp(p_1 t)$. Учет диффузии приведет к тому, что нарастать будут возмущения с волновыми векторами $k < \sqrt{uh_i \Delta\rho_i (1 - 4c\Delta\rho_i/a^2)/(2D_y)}$ и длиной волны

$$\lambda > \lambda_{\min}, \quad \lambda_{\min} = h_0 \sqrt{\frac{2}{3} \frac{q_{\text{FR}} \lambda_m \chi(q)}{\lambda_s (\beta_i - 1)}}, \quad \beta_i = \frac{h_i \lambda_m}{h_d \lambda_i e} + \frac{\lambda_m}{\lambda_{is}}. \quad (2.7)$$

(В (2.7) использована формула $\Delta\rho_i = (\beta_i - 1)/(h_i \lambda_m) > 0$.) Оценим λ_{\min} для кристалла LiF, нагруженного напряжением сдвига $\sigma = 5$ МПа. Полагая в (2.7) $\beta_i = 2$, $q_{\text{FR}} = 1$, $q = 1/2$, $\nu = 0,25$, $\sigma_f = 1$ МПа, $b = 0,3$ нм, $\mu = 4,3 \cdot 10^4$ МПа, получим $\lambda_{\min} \approx h_0 \approx 170$ нм. Проведенный анализ показал, что однородное стационарное состояние (ρ_2, ρ_i^*) является неустойчивым относительно малых возмущений, а два других состояния — устойчивыми.

Рассмотрим образец постоянного сечения (см. рис. 1), который растягивается вдоль своей оси, так что в плоскости скольжения действует касательное напряжение σ . При выполнении неравенства $\sigma > \sigma_f + \sigma_\mu$ активизируются источники дислокаций в некоторых плоскостях скольжения. Используя сформулированную выше математическую модель (1.6), исследуем развитие пластической деформации в монокристалле LiF. Предположим, что нагруженный монокристалл находится в устойчивом состоянии (ρ_1, ρ_i^*) и в некоторой плоскости скольжения источник Франка — Рида дополнительно испускает конечное число дислокаций N . Рассмотрим задачу об эволюции этого конечного возмущения.

Введя переменные

$$\begin{aligned} \tilde{y} &= y\sqrt{\rho_3}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{T}, \quad T = \frac{1}{u_w h_a \rho_3}, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_3}, \quad \tilde{\rho}_i = \frac{\rho_i}{\rho_3}, \quad \rho_{23} = \frac{\rho_2}{\rho_3}, \\ \tilde{u} &= \frac{u}{u_w} = \left(\frac{1 - \sigma_f/\sigma - \sqrt{\tilde{\rho}} \sigma_d/\sigma}{1 - \sigma_f/\sigma - \sqrt{\tilde{\rho}_w} \sigma_d/\sigma} \right)^m, \end{aligned}$$

запишем уравнения (2.5) в безразмерном виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}} &= \tilde{D} \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial \tilde{y}^2} + \tilde{f}, \quad \frac{\partial \tilde{\rho}_i}{\partial \tilde{t}} = \tilde{\varphi}, \\ \tilde{D} &= \frac{q_{\text{FR}} \tilde{u} h_0^2}{2\lambda_s h_a} \chi(q), \quad \tilde{f} = -\tilde{u} \tilde{\rho} (\sqrt{\tilde{\rho}} - \sqrt{\rho_{23}}) (\sqrt{\tilde{\rho}} - 1), \\ \tilde{\varphi} &= \tilde{\rho} \tilde{u} \frac{h_d}{h_a} (\tilde{\rho}_i^* - \tilde{\rho}_i), \quad \dot{\tilde{\varepsilon}} = \frac{\tilde{b} \tilde{\rho} \tilde{u}}{h_a \sqrt{\rho_3}}, \quad \varepsilon = \int_0^{\tilde{t}} \dot{\tilde{\varepsilon}} d\tilde{t}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

где ρ_w — характерная плотность подвижных дислокаций; u_w , σ_d — характерные скорость и напряжения, которые задаются формулами

$$\sigma_d = \sigma_\mu(\rho_3), \quad u_w = u_0((\sigma - \sigma_f - \sigma_\mu(\rho_w))/\sigma_0)^m. \quad (2.9)$$

При деформации образца происходит поворот главных осей тензора напряжений на угол $\delta\psi = \varepsilon$ относительно плоскости скольжения дислокаций (см. рис. 1). Это приводит к изменению касательного напряжения в плоскости скольжения, поэтому напряжение σ в формулах для скорости дислокаций (1.4), (2.9) нужно заменить на $\sigma' = \sigma \sin(\pi/2 + 2\varepsilon)$. Указанная поправка существенна, поскольку согласно (1.4) скорость дислокаций является быстроменяющейся функцией касательного напряжения σ .

Решение системы уравнений (2.8) ищется в области $0 < \tilde{y} < \tilde{L}$, $t > 0$. В качестве начального условия выберем устойчивое состояние $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}_1$, $\tilde{\rho}_i = \tilde{\rho}_i^*$ при $0 < \tilde{y} < \tilde{L}_1$, $\tilde{L}_1 + \Delta\tilde{H} < \tilde{y} < \tilde{L}$ и возмущенное состояние $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}_1 + \Delta\tilde{\rho}$ на отрезке $\tilde{L}_1 < \tilde{y} < \tilde{L}_1 + \Delta\tilde{H}$. На границах области $\tilde{y} = 0$, $\tilde{y} = \tilde{L}$ ставятся условия $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}_1$, $\tilde{\rho}_i = \tilde{\rho}_i^*$. Уравнения (2.8) решались численно по явной схеме второго порядка точности, приведенной, например, в [10]. Численные расчеты проводились с использованием следующих параметров: $\tilde{\rho}_1 = 0$, $\tilde{\rho}_2 = 0,01$, $\tilde{\rho}_3 = 1$, $\Delta\tilde{\rho} = 0,02$, $\tilde{\rho}_w = 10^{-3}$, $\Delta\tilde{H} = 4$, $\tilde{L}_1 = 1750$, $\tilde{L} = 3200$, $\sigma = 2,3$ МПа. Для монокристалла LiF использовались параметры: $\mu = 4,3 \cdot 10^4$ МПа, $\nu = 0,35$, $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\lambda_s = 1,3 \cdot 10^{-3}$ м, $h_a = 5 \cdot 10^{-9}$ м, $m = 8$, $\chi(q) = 1$, $\sigma_f = 1,3$ МПа, $\sigma_0 = 5$ МПа, $\alpha = 0,3$, $u_0 = 2 \cdot 10^3$ м/с, $q_{FR} = 2$.

Рассчитанные для нескольких моментов времени зависимости плотности дислокаций, скорости деформации, пластической деформации и скорости дислокаций от координаты y представлены на рис. 3, а–г соответственно. Видно, что за время $\Delta\tilde{t} = 6,7 \cdot 10^3$ ($T = 0,22$ с) начальное возмущение увеличивается до значения $\tilde{\rho} = 0,65$ и создает волны, распространяющиеся в левую и правую стороны от источника возмущений. Сначала параметры волн меняются со временем, затем процесс устанавливается и каждая из волн распространяется с постоянной скоростью. Вся деформация происходит во фронте волны (рис. 3, б), а за ее фронтом остается практически постоянной (рис. 3, в). Это объясняется тем, что за фронтом волны за счет действия внутренних напряжений σ_μ (1.4) происходит резкое торможение дислокаций, скорость которых становится равной нулю (рис. 3, г). Область между фронтами двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях, можно интерпретировать как полосу сдвига, расширяющуюся с постоянной скоростью. Полученное решение качественно согласуется с данными эксперимента [3], согласно которому вся деформация происходит во фронте полосы. (Для количественного сравнения необходимо рассчитать напряженно-деформированное состояние образца, которое в процессе деформирования существенно изменяется.) В случае, если амплитуда начального возмущения не пересекает неустойчивую точку $\Delta\tilde{\rho} < \tilde{\rho}_2$, происходит затухание этого возмущения и волны не наблюдаются.

При больших значениях напряжения $\sigma = 2,5$ МПа в расчетах также наблюдаются два резких фронта, которые на больших временах расширяются с постоянной скоростью в противоположных направлениях (рис. 4). Однако в этом случае скорость деформации отлична от нуля не только во фронте волны, но и во всей возмущенной области. Деформация линейно возрастает при смещении от фронта волны к центру полосы (рис. 4, б). Это решение можно интерпретировать как локализацию деформации, происходящую вследствие увеличения напряжения в области развития полосы сдвига.

3. Решение типа бегущей волны. Построим решение уравнений (2.5) в классе бегущих волн. Полагая плотность неподвижных дислокаций постоянной ($\partial\rho_i/\partial t = 0$), а концентрацию источников Франка — Рида малой ($n \rightarrow 0$), из (2.5) получим уравнение

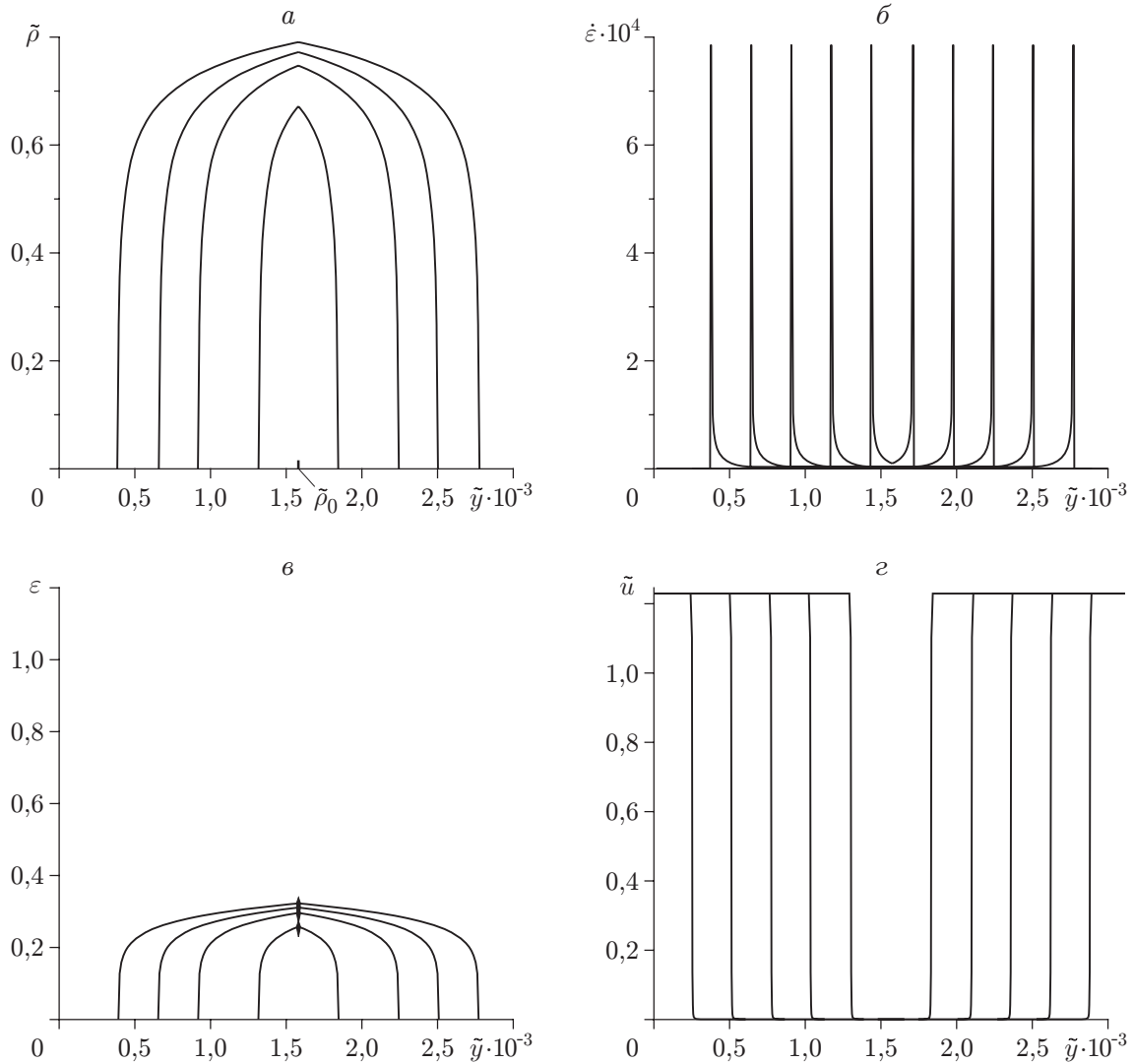


Рис. 3. Результаты численного решения уравнений (1.4), (2.8) при $\sigma = 2,3$ МПа в различные моменты времени:
a — плотность дислокаций; *б* — скорость пластической деформации; *в* — пластическая деформация; *г* — скорость дислокаций; $\tilde{\rho}_0$ — начальное возмущение плотности дислокаций

типа уравнения Колмогорова — Петровского — Пискунова — Фишера:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D_y \frac{d^2 \rho}{dy^2} + f, \quad f = u h_i (a \rho^{3/2} - \Delta \rho_i \rho - c \rho^2), \quad \rho_i = \rho_i^* \quad (3.1)$$

(скорость дислокаций $u = u(\rho)$ определена в (1.4)). Известно, что данное уравнение имеет решение в виде бегущей волны переключения, переводящей одно стационарное решение в другое [9]. Выбирая в качестве стационарных решения ρ_1, ρ_3 из (2.2), будем искать решение (3.1) в виде

$$\rho = \rho(\zeta), \quad \zeta = y - Ut, \quad (3.2)$$

удовлетворяющее граничным условиям

$$\rho = \rho_1 = 0 \quad \text{при} \quad \zeta \rightarrow \infty, \quad \rho = \rho_3 \quad \text{при} \quad \zeta \rightarrow -\infty. \quad (3.3)$$

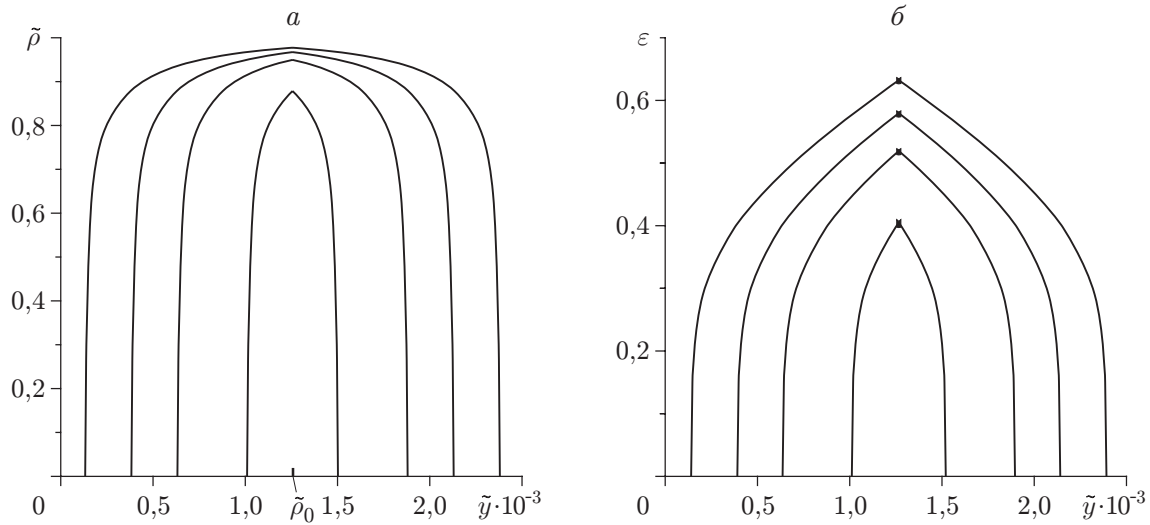


Рис. 4. Результаты численного решения уравнений (1.4), (2.8) при $\sigma = 2,5$ МПа в различные моменты времени:

a — плотность дислокаций; *б* — пластическая деформация

Подставляя (3.2) в первое уравнение (3.1), получим

$$D_y \frac{d^2 \rho}{d\zeta^2} + U \frac{d\rho}{d\zeta} + f = 0. \quad (3.4)$$

В [9] описано решение уравнения (3.4) с постоянным коэффициентом диффузии $D_y = \text{const}$ и функцией $f = \psi(\rho) = \beta\rho + \varepsilon\rho^2 - \rho^3$. При изменении аргумента характер зависимости $\psi(\rho)$ аналогичен характеру зависимости функции $f(\rho)$ в (3.1), поэтому соответствующие решения оказываются подобными.

Представим уравнение (3.4) в виде системы двух уравнений первого порядка

$$\frac{d\rho}{d\zeta} = w, \quad \frac{dw}{d\zeta} = -\frac{f + Uw}{D_y}. \quad (3.5)$$

Из алгебраических уравнений $f + Uw = 0$, $w = 0$ найдем особые точки ρ_1 , ρ_2 , ρ_3 системы (3.5), где $\rho_1 = 0$, а значения ρ_2 , ρ_3 задаются формулами (2.2). Разлагая функцию $f(\rho)$ в ряд в окрестности особых точек ρ_k и представляя решение (3.5) в виде $\rho - \rho_k = a_1 \exp(\lambda\zeta)$, $w = a_2 \exp(\lambda\zeta)$, найдем собственные значения

$$\lambda_{1,2} = -g_2/2 \pm \sqrt{g_2^2/4 + g_1}, \quad g_1 = \omega(\rho_k)/D_y(\rho_k), \quad g_2 = U/D_y(\rho_k), \quad k = 1, 3$$

в точках ρ_1 , ρ_3 и

$$\lambda_{1,2} = -g_2/2 \pm \sqrt{g_2^2/4 - g_1}, \quad g_1 = \omega(\rho_2)/D_y(\rho_2), \quad g_2 = U/D_y(\rho_2)$$

в точке ρ_2 . Здесь $\omega(\rho_1) = u(\rho_1)h_i c \sqrt{\rho_2 \rho_3} > 0$; $\omega(\rho_2) = (1/2)u(\rho_2)h_i c \sqrt{\rho_2}(\sqrt{\rho_3} - \sqrt{\rho_2}) > 0$; $\omega(\rho_3) = (1/2)u(\rho_3)h_i c \sqrt{\rho_3}(\sqrt{\rho_3} - \sqrt{\rho_2}) > 0$. Отсюда следует, что в точках ρ_1 , ρ_3 собственные значения имеют разные знаки ($\lambda_1 < 0$, $\lambda_2 > 0$ при $U > 0$), поэтому точки ρ_1 , ρ_3 являются седлами. Характер особой точки ρ_2 зависит от скорости волны U . При $g_2^2 > 4g_1$ точка ρ_2 — узел, а при $g_2^2 < 4g_1$ — фокус. Если точка ρ_2 — узел, то попасть из точки ρ_1 в точку ρ_3 невозможно; если точка ρ_2 — фокус, то существует единственное значение скорости U , при котором непрерывным образом по сепаратрисе можно попасть из точки ρ_1

в точку ρ_3 . Выбор знака величины U определяется из условия перехода системы в состояние с наименьшей “потенциальной энергией” $-V(\rho) = - \int f(\rho) d\rho$ [9], которая в данном случае равна

$$-V(\rho) = uh_i\rho(\Delta\bar{\rho}_i\rho - \bar{a}\rho^{3/2} + \bar{c}\rho^2), \quad \Delta\bar{\rho}_i = \Delta\rho_i/2, \quad \bar{a} = 2a/5, \quad \bar{c} = c/3.$$

Поскольку в первом устойчивом стационарном состоянии ($\rho_1 = 0$) $-V(\rho_1) = 0$, а во втором ($\rho_3 = (a/c)^2$) $-V(\rho_3) = -(4/15)uh_ia(a/c)^5 < 0$, в волне переключения происходит переход из состояния ρ_1 в состояние ρ_3 и волна распространяется влево ($U > 0$). В данном случае, в отличие от [9], не удается построить точное решение уравнения (3.4). Однако при больших напряжениях ($\sigma \gg \sigma_f + \sigma_\mu$), когда зависимостью скорости дислокаций от их плотности можно пренебречь, такое решение существует. Введя безразмерные координаты

$$\tilde{\zeta} = \zeta\sqrt{\rho_3}, \quad \tilde{\rho} = \rho/\rho_3, \quad \tilde{U} = U/(uh_a\sqrt{\rho_3})$$

и считая $u = \text{const}$, запишем (3.4) в виде

$$\tilde{A} \frac{d^2\tilde{\rho}}{d\tilde{\zeta}^2} + \tilde{U} \frac{d\tilde{\rho}}{d\tilde{\zeta}} + f = 0, \quad f = -\tilde{\rho} \left(\sqrt{\tilde{\rho}} - \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_3}} \right) (\sqrt{\tilde{\rho}} - 1), \quad \tilde{A} = \frac{D_y}{uh_a}, \quad (3.6)$$

где ρ_2, ρ_3 — корни уравнения $f = \rho(a\sqrt{\rho} - \Delta\rho_i - c\rho) = 0$:

$$\rho_{2,3} = (a/(2c) \mp \sqrt{G})^2, \quad G = (a/(2c))^2 - \Delta\rho_i/c.$$

Записав граничные условия (3.3) в безразмерных переменных

$$\tilde{\rho} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \tilde{\zeta} \rightarrow \infty, \quad \tilde{\rho} \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad \tilde{\zeta} \rightarrow -\infty,$$

получим решение уравнения (3.6) в виде

$$\tilde{\rho} = 1/(1 + \exp(\tilde{\zeta}/\delta))^2, \quad \tilde{U} = \sqrt{6\tilde{A}}(\sqrt{G/\rho_3} - 1/6), \quad \delta = \sqrt{6\tilde{A}}. \quad (3.7)$$

На рис. 5 показаны результаты численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений (3.5), (3.6) в фазовой плоскости $w = d\tilde{\rho}/d\tilde{\zeta}$, $\tilde{\rho}$ при $A = 1$, $\tilde{\rho}_2/\tilde{\rho}_3 = 0,2$ и различных значениях скорости волны U (знак “ \sim ” над безразмерными величинами на рис. 5 опущен). Штриховой линией показано точное решение (3.7) $w = -2\tilde{\rho}(1 - \sqrt{\tilde{\rho}})/\sqrt{6\tilde{A}}$ в фазовой плоскости w, ρ . Видно, что рассчитанная картина интегральных кривых при различных значениях скорости волны U согласуется с результатами проведенного выше качественного анализа поведения решения системы уравнений (3.5). При значениях $U = 0,1$ и $U = 0,4$ особая точка $\tilde{\rho}_2 = 0,2$ является фокусом, в который попадают интегральные кривые, выходящие либо из точки $\tilde{\rho}_1 = 0$ (рис. 5,а), либо из точки $\tilde{\rho}_3 = 1$ (рис. 5,в). При значении $U = 0,8$ точка $\tilde{\rho}_2 = 0,2$ является устойчивым узлом, в который попадают сразу две интегральные кривые, выходящие из точек $\tilde{\rho}_1 = 0$ и $\tilde{\rho}_3 = 1$ (рис. 5,г). Только при значении $U = 0,262$ существует непрерывная интегральная кривая (сепаратриса), связывающая начальное ($\tilde{\rho}_1 = 0$) и конечное ($\tilde{\rho}_3 = 1$) состояния (рис. 5,б). Данное значение $U = 0,262$ равно скорости бегущей волны.

В общем случае при переменной скорости дислокаций решение типа бегущей волны может быть получено в результате численного решения системы уравнений (2.8), (1.4) в области $0 < \tilde{\zeta} < 1$ при соответствующих граничных условиях. Полученное в расчетах решение аналогично решениям, представленным на рис. 3, 4, на которых точку максимума плотности дислокаций необходимо сместить в начало координат и рассматривать только одну волну, бегущую вправо либо влево. Следует отметить, что в отличие от точного решения (3.7) максимальная плотность дислокаций в численном решении, приведенном на рис. 3,а, меньше единицы. Это обусловлено зависимостью скорости дислокации

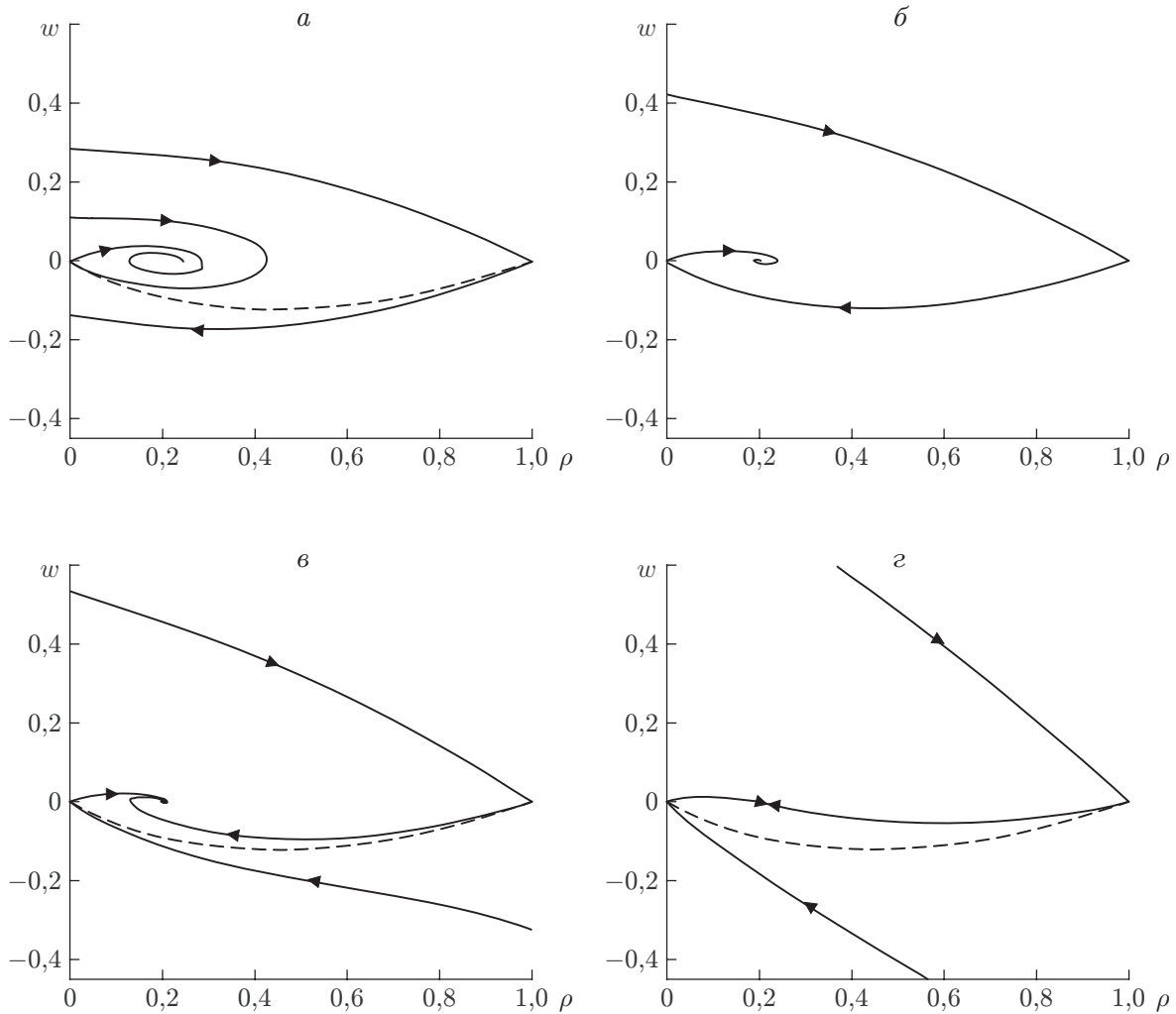


Рис. 5. Интегральные кривые системы уравнений (3.5) в фазовой плоскости $w = d\tilde{\rho}/d\tilde{\zeta}$, $\tilde{\rho}$ при различных значениях U :
 а — $U = 0,1$; б — $U = 0,262$; в — $U = 0,4$; г — $U = 0,8$; штриховая линия — точное решение уравнения (3.7)

от плотности (1.4), из которой следует, что при плотности $\rho_4 = ((\sigma - \sigma_f)/(\alpha\mu b))^2$ скорость дислокации равна нулю. В этом случае правые части уравнений (2.5), (2.8) обращаются в нуль, что дает дополнительно к (2.2) еще одно стационарное решение $\partial\rho/\partial t = \partial\rho_i/\partial t = 0$, в котором $\rho = \rho_4$. (При делении в (2.5), (2.8) первого уравнения на второе скорость сокращается, поэтому при получении стационарных решений (2.2) данное решение было потеряно.) Если выполняется неравенство $\tilde{\rho}_4 < 1$, то реализуется решение, показанное на рис. 3, в котором максимальная плотность дислокаций $\tilde{\rho}_{\max} = \tilde{\rho}_4$, где $\tilde{\rho}_4 = \rho_4/\rho_3$. В случае обратного неравенства $\tilde{\rho}_4 > 1$ реализуется решение, приведенное на рис. 4, в котором максимальная плотность дислокаций $\tilde{\rho}_{\max} = 1$.

Заключение. Предложена математическая модель развития пластической деформации вследствие действия механизма двойного поперечного скольжения. Построено решение типа бегущей волны и изучена его структура. Исследована устойчивость однородного состояния монокристалла. Показано, что если возмущение попадает в неустойчивую область, то происходит его рост, после чего в противоположных направлениях распространяются две полосы сдвига, каждая из которых описывается решением типа бегущей волны. Воз-

можно два типа решений, зависящих от величины приложенного напряжения. При малых напряжениях пластическая деформация происходит во фронте полосы сдвига, за фронтом волны деформация остается постоянной. При больших напряжениях скорость деформации за фронтом волны отлична от нуля и деформация линейно возрастает при удалении от фронта волны. Результаты расчетов качественно согласуются с экспериментальными данными.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Фридель Ж.** Дислокации. М.: Мир, 1967.
2. **Цигенбайн А., Плессинг Й., Нойхайзер Й.** Исследование мезоуровня деформации при формировании полос Людерса в монокристаллах концентрированных сплавов на основе меди // Физ. мезомеханика. 1998. Т. 1, № 2. С. 5–20.
3. **Смирнов Б. И.** Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Л.: Наука. Ленингр. отд-ние, 1981.
4. **Малыгин Г. А.** Процессы самоорганизации дислокаций и пластичность кристаллов // Успехи физ. наук. 1999. Т. 169, № 9. С. 979–1010.
5. **Hahner P.** Theory of solitary plastic waves. 1. Luders bands in polycrystals // Appl. Phys. A. 1994. V. 58. P. 41–48.
6. **Hahner P.** Theory of solitary plastic waves. 2. Luders bands in single glide-oriented crystals // Appl. Phys. A. 1994. V. 58. P. 49–58.
7. **Киселев С. П.** Внутренние напряжения в твердом теле с дислокациями // ПМТФ. 2004. Т. 45, № 4. С. 131–136.
8. **Годунов С. К., Роменский Е. И.** Элементы механики сплошных сред и законы сохранения. Новосибирск: Науч. кн., 1998.
9. **Карлов Н. В., Кириченко Н. А.** Колебания, волны, структуры. М.: Физматлит, 2001.
10. **Годунов С. К., Рябенький В. С.** Разностные схемы. М.: Наука, 1973.

Поступила в редакцию 26/XII 2005 г.
