

П
Г 71

4



С. Б. Горячев А. В. Шаленков

027-89

РЕЛАКСАЦИЯ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ
ПРИ ОТЖИГЕ КРИСТАЛЛОВ
(ТРЕХМЕРНАЯ ДИСЛОКАЦИОННАЯ СЕТКА)

МОСКВА 1989

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ СССР ПО
НАРОДНОМУ ОБРАЗОВАНИЮ
МОСКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

С.Б.Горячев, А.В.Шаленков

РЕЛАКСАЦИЯ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ
ОТЖИГЕ КРИСТАЛЛОВ (ТРЕХМЕРНАЯ ДИСЛОКАЦИОННАЯ
СЕТКА)

Препринт 027-89

Утверждено
редсоветом института

Москва 1989

Горячев С.Б., Шаленков А.В. Релаксация дислокационной структуры при отжиге кристаллов (трехмерная дислокационная сетка). - М.: Препринт/МИФИ, 027 -89, 1989. - 24 с.

Используя результаты компьютерного моделирования эволюции трехмерной дислокационной сетки, получены уравнения кинетики пространственно неоднородной дислокационной среды при термическом отжиге кристаллов. Найдены асимптотические функции распределения длин звеньев дислокационной сетки, когда их подвижность обусловлена объемной и трубочной диффузией вакансий.

С Московский инженерно-физический институт, 1989 г.

Рукопись поступила в издательский отдел 23.05.89

Ответственный за выпуск Шаленков А.В.

Л. - 21102 Подписано в печать 29/V-1989г. Формат 60x84 1/16

п.л. 1,5 Уч.-изд.л. 1,5 Тираж 120 экз.

Изд. № 027-89 Заказ 202/11 Цена 10 коп

Московский инженерно-физический институт. Типография МИФИ.
115409 Москва, Каширское шоссе, д.31

ТРЕХМЕРНАЯ ДИСЛОКАЦИОННАЯ СЕТКА

В первой части работы [1] анализ кинетики релаксации дислокационной структуры в кристаллах при отжиге проведен на простейшей модельной системе – ансамбле прямолинейных бесконечных параллельных дислокаций. Хотя эта система топологически существенно отличается от реальных дислокационных структур, тем не менее установленные для нее закономерности пространственно-временного поведения имеют, как мы увидим позже, достаточно общий характер. В частности, возможно проявление эффектов самоорганизации системы – возникновения и развития пространственно-периодических структур.

Во второй части работы [2] изучалось поведение плоских дислокационных сеток при отжиге кристаллов. Такие дислокационные системы в значительно большей степени, чем ансамбль прямолинейных бесконечных дислокаций соответствуют реально наблюдаемым дислокационным структурам – так называемым субграницам, возникающим в кристалле в режиме горячей деформации (при температуре $T > 0,5 T_m$, где T_m – температура плавления). Настоящая работа посвящена исследованию релаксации трехмерной дислокационной сетки при отжиге кристаллов – наиболее важного и распространенного, как показывают экспериментальные наблюдения, элемента реальных дислокационных структур. Такая сетка образуется, например, при холодной деформации кристаллов ($T < 0,4 T_m$), когда кристаллы ориентированы для множественного скольжения и степень деформации невелика (до $\approx 5\%$) [3]. Причем распределение дислокаций по объему кристалла является неоднородным, образуется так называемая ячеистая структура и плотность дислокаций в границах ячеек существенно выше, чем внутри них. При горячей деформации, как уже отмечалось выше, формируется субзеренная дислокационная структура, но внутри субзерен дислокации образуют трехмерные сетки [4]. Кроме того, у некоторых металлов и сплавов с малой энергией дефекта упаковки (например у хром-никелевых сталей [5]) не было обнаружено образования субзерен при горячей деформации, и дислокации при этом достаточно однородно распределялись по

объему кристалла, также образуя трехмерные сетки. Таким образом, исследование кинетики релаксации трехмерной дислокационной сетки имеет важное практическое значение.

Описание релаксации случайной трехмерной дислокационной сетки, как и плоской сетки [2], представляет собой одну из задач теории однородных разупорядоченных систем, для которых пока не найдены общие методы решения [6]. В [2] для двумерного случая задача была решена с использованием математического аппарата известной теории диффузионного распада твердых растворов Лифшица-Слезова [7] по аналогии с теорией нормального роста зерен в поликристалле [8]. Однако для трехмерной задачи не удается в полной мере реализовать этот путь решения, т.к. с топологической точки зрения она является значительно более сложной. Так Лагнеборг [9], по аналогии с теорией роста зерен [8], предложил ввести для описания сетки функцию $f(\ell, t)$ распределения длин звеньев сетки ℓ в единице объема кристалла и находить ее из уравнения непрерывности в пространстве размеров

$$\frac{\partial f(\ell, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \ell} \left(\frac{d\ell}{dt} \cdot f(\ell, t) \right) = 0, \quad (1)$$

записывая условие нормировки $f(\ell, t)$ в виде

$$\int_0^{\infty} \ell^3 f(\ell, t) d\ell = \text{const} = I_3 \quad (2)$$

и определяя скорость изменения длины ℓ звена сетки в процессе отжига из уравнения

$$\frac{d\ell}{dt} = -a M E_t \left(\frac{1}{\ell} - \frac{1}{\ell_0} \right), \quad (3)$$

где a - константа, зависящая от геометрии сетки, ℓ_0 - критическая длина звеньев сетки, M - подвижность звеньев сетки [2], E_t - линейное натяжение. Система уравнений (1) - (3) была решена методом Лифшица-Слезова [7]. Она имеет асимптотическое решение, не зависящее от начальной функции распределения $f(\ell, 0)$, которое удобно записать вводя относительный размер звена сетки $u = \ell/\ell_0$ и функцию $p(u)$ такую, что

$$\rho(u) = \frac{\ell_0}{\int_0^{\infty} f(\ell, t) d\ell} f(\ell, t). \quad (4)$$

Из определения $\rho(u)$ очевидно следует что

$$\int_0^{\infty} \rho(u) du = 1. \quad (5)$$

(Вид функции $\rho(u)$ показан на рис. 3, б).

Зависимость ℓ_0 от времени имеет вид:

$$\ell_0^2(t) - \ell_0^2(0) = K_L t, \quad (6)$$

где $\ell_0(0)$ - критическая длина в начальный момент времени, $K_L = \alpha M E_t / 2$. Легко показать, что среднее значение $\bar{\ell} = \frac{2}{3} \ell_0$ и, следовательно (6) выражает зависимость средней длины звеньев сетки от времени отжига. Записывая выражение для плотности дислокаций

$$\rho(t) = \int_0^{\infty} \ell f(\ell, t) d\ell, \quad (7)$$

из (6) можно получить уравнение для скорости ее изменения

$$\frac{d\rho}{dt} = -\alpha_L \rho^2 \quad (8)$$

и зависимость плотности от времени

$$1/\rho(t) - 1/\rho(0) = \alpha_L t, \quad (9)$$

где $\alpha_L = K_L / (c I_3)$, $c \approx 0,93$.

Соотношение между плотностью дислокаций и средней длиной звеньев сетки имеет вид

$$\rho(t) = a_1 / (\bar{\ell}(t))^2, \quad (10)$$

где $a_1 \approx 0,73$.

Вернемся теперь к обсуждению основополагающих соотношений

(1)-(3) теории Лагнеборга. На наш взгляд использование при описании релаксации трехмерной дислокационной сетки с теорией роста зерен не является обоснованным. Действительно, в теории роста зерен соотношение типа (3) имеет четкий физический смысл: скорость изменения радиуса кривизны зерна пропорциональна разности между кривизной самого зерна и средней кривизной окружающих его зерен. Пространственную дислокационную сетку, в

каждом узле которой соединяются три звена, нельзя представить в виде набора соприкасающихся друг с другом геометрически подобных объемных ячеек, ребра которых являлись бы звеньями сетки. Таким образом, в данном случае не удастся выделить структурный элемент, размер которого изменялся бы в соответствии с уравнением (3). По тем же самым причинам нет основания предполагать, что выполняется условие (2). Из-за невозможности аналитического решения задачи о релаксации трехмерной дислокационной сетки основным методом исследования стало компьютерное моделирование этого явления. Оно позволило не только получить кинетические зависимости релаксации дислокационной структуры, но и дало возможность, используя промежуточные статистические данные, установить вид уравнения (3) и соотношения (2), ввести их в теорию как основополагающие соотношения и сравнить вытекающие из теории результаты с другими данными моделирования.

Компьютерное моделирование релаксации трехмерной дислокационной сетки при отжиге

Математическая модель

Метод построения пространственной сетки был полностью аналогичен описанному в [2] алгоритму для плоской сетки. Единственным отличием было то, что точки - узлы дислокационной сетки случайно размещались в кристалле формы куба $R \times R \times R$, а не квадрата. Общее исходное число узлов N изменялось от 668 до 1500, и сетка состояла из $10^3 - 2 \cdot 10^3$ звеньев в различных вариантах. Как и в [2] строились сетки с векторами и без векторов Бюргерса.

Распределение дислокаций по семействам векторов Бюргерса достаточно равномерное, что согласуется с данными экспериментального изучения такого же распределения для пространственной дислокационной сетки в Al при ползучести [3]. Распределение углов между дислокациями и векторами Бюргерса в Al при ползучести [4] аналогично распределению, построенному для нашей сетки. Таким образом, принятая модель исходной случайной трехмерной сетки, по-видимому, достаточно хорошо имитирует реальную дислокационную структуру [3-5].

Как уже отмечалось в [1], [2], мы рассматриваем релаксацию нейтральных дислокационных структур, т.е. структур, у которых значение тензора плотности дислокаций $\hat{\alpha}$ равно нулю как для кристалла в целом так и для отдельных его областей. Процедура построения сетки [2] обеспечивает такую нейтральность. Действительно, средний тензор плотности дислокаций для всего моделируемого кристалла в исходном состоянии имеет вид

$$\langle \hat{\alpha} \rangle = \frac{1}{R} \begin{pmatrix} -1,4 & 4,2 & 7,3 \\ 2,8 & -2,8 & 2,0 \\ 1,4 & -1,4 & -2,8 \end{pmatrix} \cdot 10^{-4} \quad (11)$$

и относительное отклонение любой компоненты $\langle \hat{\alpha} \rangle$ от аналогичной скалярной величины $\nu \rho = 1,86 \cdot 10^{-2} \frac{1}{R}$ не превышает 0,04, т.е. $\langle \hat{\alpha} \rangle$ практически равен нулю.

Отклонение среднего значения тензора плотности $\langle \hat{\alpha}(t) \rangle$ от нуля связано с конечностью числа "частиц" (звеньев сетки m) в системе. Относительная величина такого отклонения как известно равна примерно $1/\sqrt{m}$, что при $m=1500$ дает наблюдаемую величину. Алгоритмы перемещения узлов сетки и дислокационных реакций при релаксации совпадают с описанными в [2], с тем отличием, что в трехмерной сетке любая из указанных дислокационных реакций протекает без ограничений.

Расчет проводился для четырех вариантов дислокационной сетки, исходные данные для них приведены в таблице.

Исходные данные для расчета

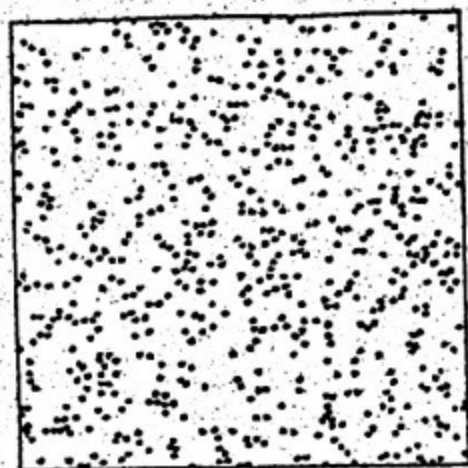
Вид сетки	Число узлов N	Число звеньев сетки, m	Плотность дислокаций, $\rho \nu^2$	Размер кристалла, R	Масштаб времени, $t \cdot 10^4 \frac{ME_t}{\nu^2}$	Плотность дислокаций, cm^{-2}	Вариант
Без векторов Бюргерса	666	999	$9,1 \cdot 10^{-7}$	$10^4 \nu$	10^4	$9,1 \cdot 10^8$	1
Векторы Бюргерса	1500	2250	$1,61 \cdot 10^{-7}$	$10^4 \nu$	10^4	$1,9 \cdot 10^9$	2
Бюргерса	666	999	$9,1 \cdot 10^{-7}$	$10^3 \nu$	10^2	$9,1 \cdot 10^{10}$	3
С векторами Бюргерса	1000	1500	$1,86 \cdot 10^{-6}$	$10^4 \nu$	10^4	$1,86 \cdot 10^9$	4

Анализ пространственных конфигураций трехмерной дислокационной сетки при отжиге

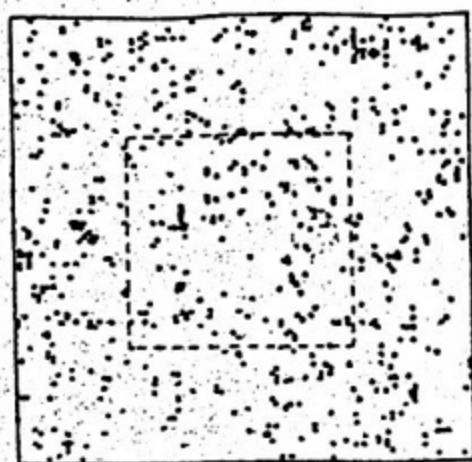
Наглядную информацию о геометрии сетки дает визуальный анализ ее конфигураций в различные моменты времени. На рис. 1, а показана проекция узлов сетки на одну из граней кристалла в начальный момент времени. Видно, что распределение узлов равномерное. На рис. 1, б показана та же проекция узлов, но в более поздний момент времени, соответствующий выходу процесса релаксации на некоторый установившийся режим. Узлы сетки распределены неоднородно по объему кристалла. Существуют области, где плотность узлов возросла и области, где их плотность уменьшилась. На рис. 2, а в большем масштабе представлен обведенный пунктиром фрагмент рис. 1, б, где изображены не только узлы, но и дислокационные звенья. Видно, что в кристалле даже после непродолжительного отжига возникают неоднородности в распределении дислокаций по его объему.

На рис. 3, а показаны функции распределения расстояний между узлами сетки в различные моменты времени. В начальный момент времени эта функция близка к пуассоновскому распределению. Однако с течением времени она становится бимодальной, т.е. в сетке возникают два характерных расстояния между узлами: одно — порядка среднего расстояния между узлами $\rho^{-1/2}$, другое — среднее расстояние между пространственными неоднородностями дислокационной среды, порядка $4\rho^{-1/2}$.

На рис. 3, б показано изменение функции распределения длин звеньев сетки $\rho(l/\bar{l})$ в процессе отжига. Существенным в кинетике изменения $\rho(l/\bar{l})$ является то, что начиная с некоторого момента времени t_e , которое можно назвать временем выхода на установившейся режим релаксации, эта функция меняется достаточно слабо. Сравнение результатов расчета $\rho(l/\bar{l})$ с результатами аналитического описания кинетики релаксации сетки (Лагнеборг [5]) показывает, что хотя тенденции изменения $\rho(l)$ и $\rho(l/\bar{l})$ совпадают, в частности, выход на установившийся режим для функции $\rho(l)$, однако, положение максимума функций $\rho(l)$ и $\rho(l/\bar{l})$ и их внешний вид несколько отличаются друг от друга.

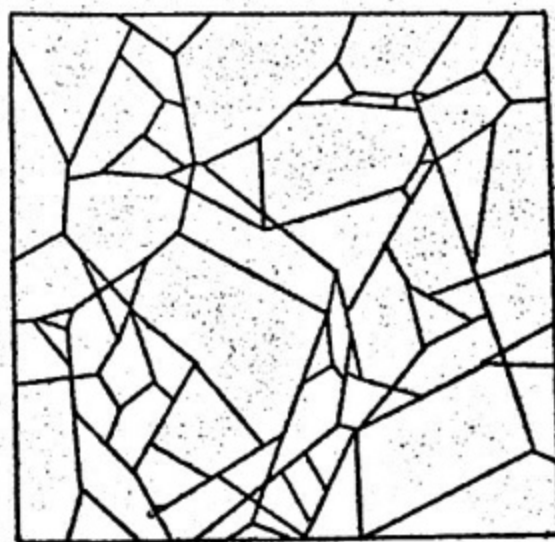


а)

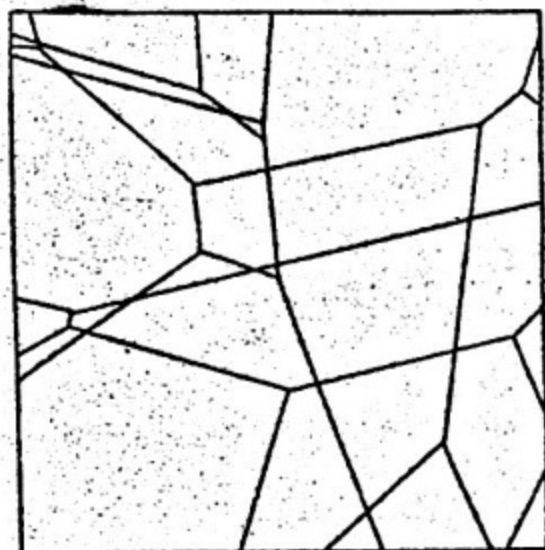


б)

Рис. 1. Проекция узлов сетки на одну из граней кристалла:
а) начальный момент времени, б) $t = 100t_0$ (вариант 2)



а)



б)

Рис. 2. Фрагменты дислокационной сетки: а) начальный момент времени, б) $t = 100t_0$ (вариант 2)

Геометрия дислокационных ячеек сетки исследовалась путем анализа функции распределения углов между звеньями, образующими узел. На рис. 4,2 приведены функции $g(\varphi, t)$ в различные моменты времени. В процессе отжига сетки постепенно увеличивается число узлов, образованных звеньями, угол между которыми близок к 120° (равновесное положение). На рис. 4,6 показано изменение во времени среднего значения угла между звеньями сетки $\bar{\varphi}$. Начиная с некоторого момента времени t_φ (см. рис. 4,6) $\bar{\varphi}$ меняется слабо и функция $g(\varphi, t)$ в этом случае приобретает стационарный вид (см. рис. 4,2). Таким образом, начиная с момента времени t_e устанавливается режим релаксации, при котором $\rho(u)$ не меняется, а $g(\varphi, t)$ меняется во времени. Изменение $g(\varphi, t)$ означает, что любая объемная ячейка, образованная тремя звеньями, сходящимися в один узел меняет не только свои размеры, но и геометрию (не остается себе подобной, как это предполагал Лагнеборг [9]). В связи с этим кинетика релаксации трехмерной сетки в данный период времени не описывается, как мы увидим ниже, из результатов моделирования, теорией [9]. Начиная с некоторого момента времени t_φ , функция $g(\varphi, t)$ также как и $\rho(u)$ будет стационарной и установится действительно стационарный режим релаксации, для которого теория [9] справедлива.

Кинетика релаксации трехмерной сетки

Наибольший интерес с точки зрения приложений теории отжига дислокационной структуры, представляет зависимость от времени средней плотности дислокаций $\rho(t)$. На рис. 5,2 точками представлены зависимости $\rho(t)$ для всех вариантов расчета и сплошными линиями показана зависимость (9). Стрелками отмечены моменты t_e и t_φ выхода системы на установившиеся режимы релаксации для функций $\rho(u, t)$ и $g(\varphi, t)$ соответственно. Как показывает анализ этих результатов момент t_e соответствует времени, когда $\rho(0)/\rho(t_e) \approx \sqrt{3}$, а t_φ - времени, когда $\frac{\rho(0)}{\rho(t_\varphi)} \approx 3$. Видно, что режим $t_e < t < t_\varphi$ был достигнут во всех вариантах моделирования (1-4), а режим $t > t_\varphi$ только для вариантов 3,4, причем последний потребовал значительных затрат

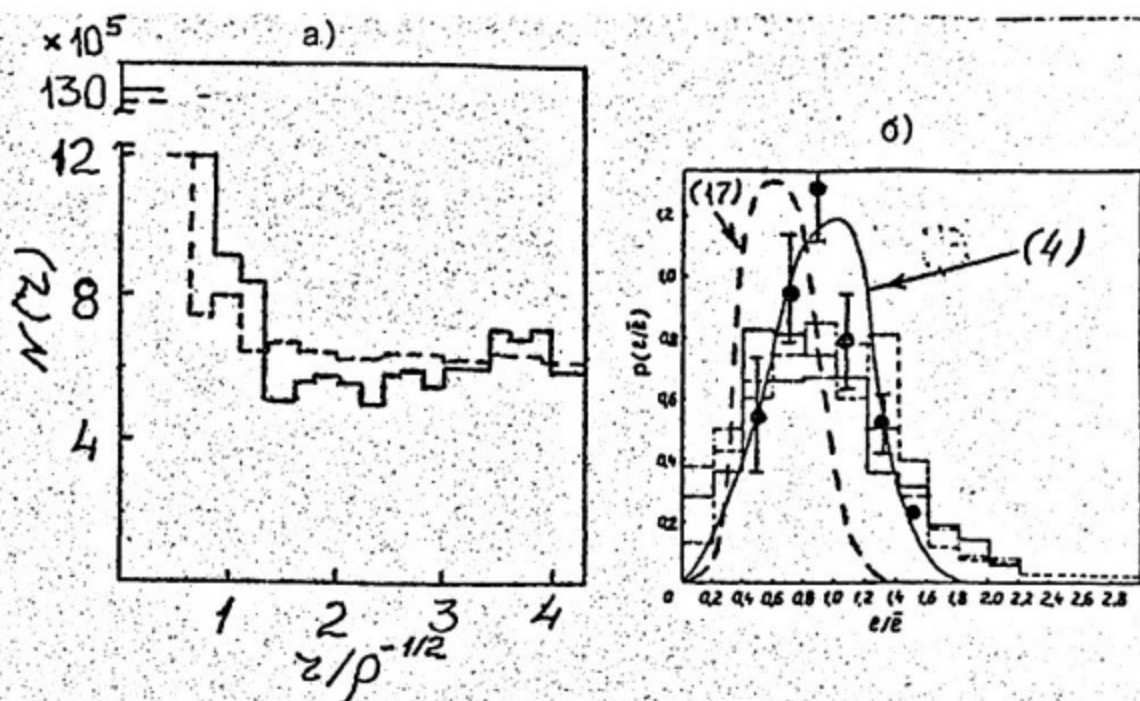


Рис.3. Функции распределения: а) расстояний между узлами сетки (--- $t=t_e$, — $t=100t_e$), б) длин звеньев сетки (--- $t=0$, -.- $t=t_e$, — $t=100t_e$) (вариант 2) (● - экспериментальные данные [5])

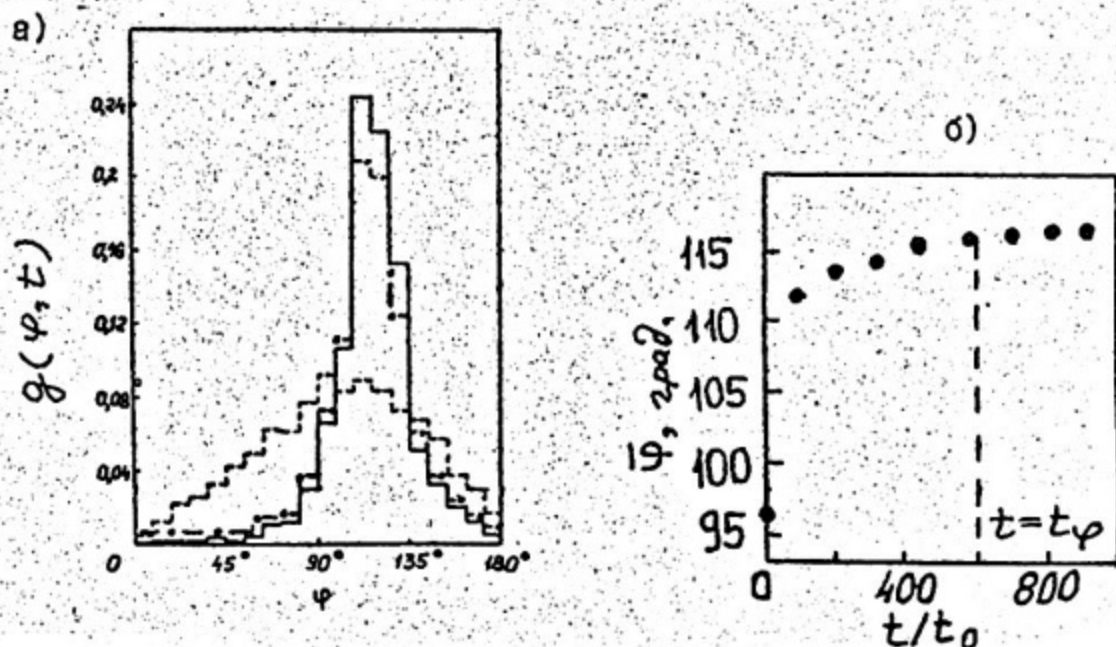


Рис.4. Изменение: а) функции распределения углов между звеньями сетки, образующими узел (--- $t=0$, -.- $t=t_\varphi$, — $t=100t_\varphi$) б) среднего значения угла между звеньями от времени отжига (вариант 4)

компьютерного времени. Уравнение (8) дает, как видно из рис. 5,2, более высокую скорость уменьшения плотности для режима $t_e < t < t_\varphi$, чем это наблюдается при моделировании. Если ввести вместо $t_0 = b^2 / ME_t$ переменную $\tau = 1 / ME_t \rho(0)$, также имеющую размерность времени, и представить результаты всех вариантов расчетов (1, 2, 3) дислокационной сетки без векторов Бюргерса в координатах $\rho^2(0) / \rho^2(t)$ и t / τ (рис. 5,8), то окажется, что независимо от значений параметров b, R, N все точки лежат на одной прямой. По данным рис. 5,8 нетрудно установить зависимость средней плотности дислокаций от времени при $t_e < t < t_\varphi$:

$$\bar{\rho}^2(t) - \bar{\rho}^2(t_e) = 1,15 \alpha ME_t (t - t_e) / \rho(t_e), \quad (12)$$

где $\alpha = 3$, и найти выражение для скорости изменения средней плотности дислокаций при $t_e < t < t_\varphi$:

$$\frac{d\rho}{dt} = - \frac{\alpha ME_t}{\rho(0)} \rho^3. \quad (13)$$

Это уравнение не совпадает с аналогичным уравнением (8) релаксации дислокационной структуры теории Лагнеборга. Наличие векторов Бюргерса у звеньев дислокационной сетки (вариант 4) не меняет закона релаксации (12) для $t_e < t < t_\varphi$ (рис. 5,2), но приводит к уменьшению скорости релаксации (константа $\alpha \approx 0,5$) из-за ограничений на возможные дислокационные реакции при пересоединениях дислокационных узлов: при моделировании кинетики сетки с векторами Бюргерса дополнительно учитывался тип "B" дислокационных реакций [2], который не приводит к исчезновению звена малой длины, а лишь к его скачкообразному развороту.

Начиная с момента времени t_φ , когда устанавливается топологическая стационарность дислокационной сетки (стационарность функции $\rho(u, t)$ и $g(\varphi, t)$), скорость уменьшения плотности дислокации увеличивается и кинетика релаксации описывается уравнением (8) в соотношении (9) с $\alpha_x = 0,2$ (см. рис. 5,2).

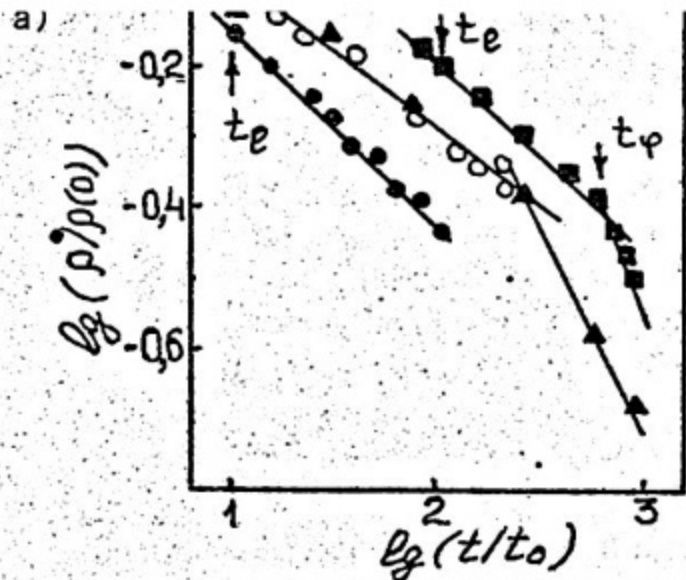


Рис.5. Зависимости плотности дислокаций от времени отжига (○ - вариант I, ● - вариант 2, ▲ - вариант 3, ■ - вариант 4)

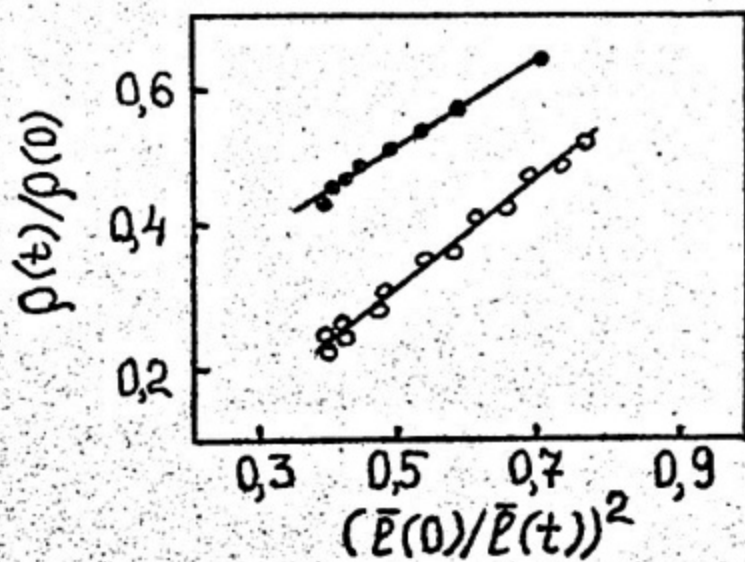
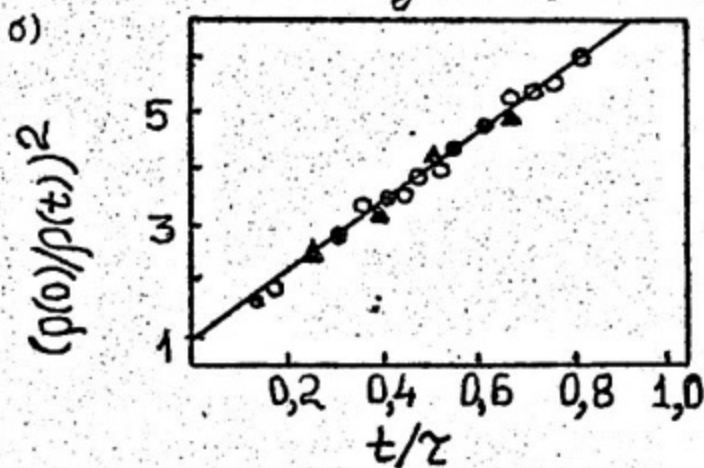


Рис.6. Зависимости плотности дислокаций от средней длины звеньев сетки (● - вариант 2, ○ - вариант 4)

Соотношение между плотностью дислокаций и средней длиной звена (10) выполняется для всех моментов времени (рис. 6). По данным моделирования $a_1 \approx 0,62$ для вариантов 1, 2, 3 и $a_1 \approx 0,9$ для варианта 4.

Компьютерное моделирование представляет уникальную для теории возможность проверить не только итоговые уравнения типа (3), но и правомерность некоторых ^{по}предложений, заложенных в основание теории. Как отмечалось выше, одним из таких соотношений является условие нормировки (2), которому Лагнеборг придавал смысл среднего объема некой пространственной дислокационной ячейки. На рис. 7 показано изменение I_3 во времени по результатам моделирования. Видно, что начиная с момента времени t_e , I_3 практически не изменяется и это говорит в пользу возможности введения в теорию соотношения

(2), как это сделано у Лагнеборга, даже в случае, если $g(\varphi, t)$ не установилась. Стационарные значения I_3 по данным моделирования составляют $\approx 1,8$ и $\approx 7,7$ для вариантов 1, 2, 3 и 4 соответственно. Для сравнения на этом же рисунке показано изменение во времени величины

$$I_2 = \int_0^{\infty} e^2 f(e, t) de, \quad (14)$$

имеющий смысл средней площади дислокационной ячейки.

Другим важным соотношением в теории является уравнение (3) для скорости изменения длины сегмента. На рис. 8 точками показано корреляционное поле величин $\frac{1}{e} - \frac{1}{e}$ и $\frac{de}{dt}$ для некоторого момента времени, сплошной линией усредненная по нескольким моментам времени ($t_e < t < t_\varphi$) зависимость $\frac{de}{dt}$ от $\frac{1}{e} - \frac{1}{e}$. В отличие от плоской сетки [2] эта зависимость для трехмерной сетки нелинейна даже в окрестности точки $\frac{de}{dt} = 0$, иначе говоря уравнение (3) не справедливо при $t_e < t < t_\varphi$.

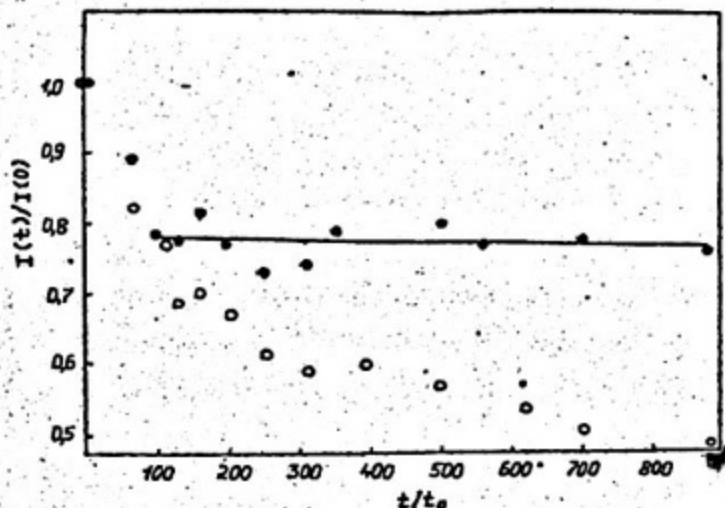


Рис. 7. Зависимости $I_3 = \int_0^{\infty} e^{-3\epsilon} f(\epsilon) d\epsilon$ - ● и $I_2 = \int_0^{\infty} e^{-2\epsilon} f(\epsilon) d\epsilon$ от времени отжига (вариант 4).

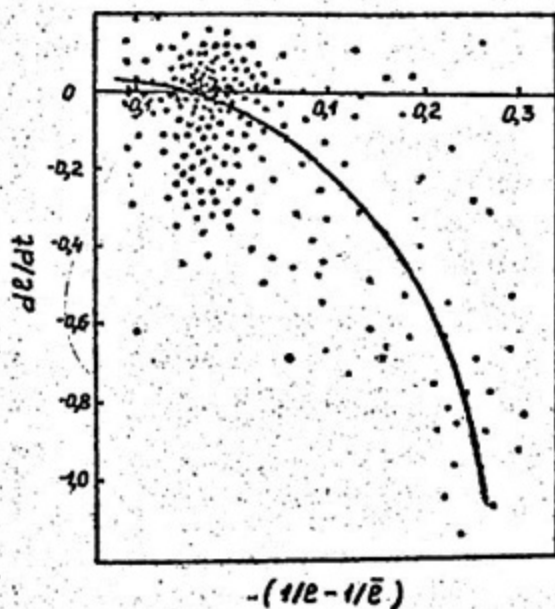


Рис. 8. Распределение скоростей изменения длины звеньев сетки $d\epsilon/dt$ - ● и усредненных по нескольким периодам отжига этих же скоростей в зависимости от $(1/\bar{\epsilon} - 1/\bar{\epsilon})$ (вариант 2).

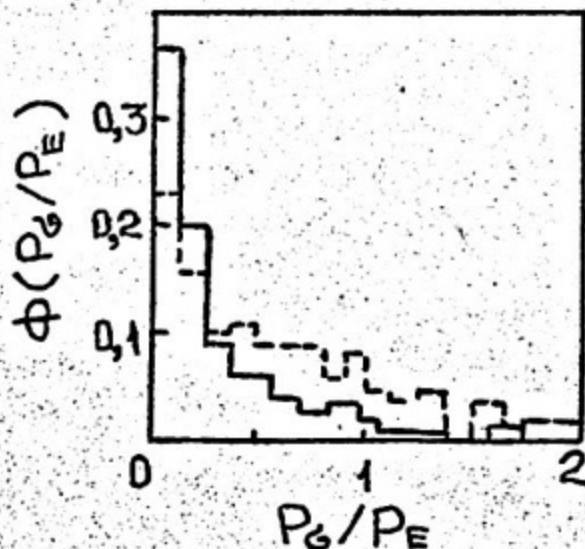


Рис. 9. Функция распределения отношения силы, действующей на звено из-за упругих полей напряжений P_G , к силе, соответствующей напряжению старта источника Франка-Рида (--- $t=0$, — $t=10^3 t_0$) (вариант 4).

Нейтральность дислокационной сетки и роль упругих далекодействующих полей внутренних напряжений дислокаций

Как отмечалось в разделе 3.1.1 исходная дислокационная сетка (вариант 4) практически нейтральна. Расчеты тензора $\langle \hat{\alpha}(t) \rangle$ показывают, что он остается равным нулю и в процессе релаксации. В момент времени, когда плотность дислокаций $\rho(t)$ уменьшилась вдвое по сравнению с $\rho(0)$, отклонение компонент $\langle \hat{\alpha}(t) \rangle$ не превышало 9%. Увеличение относительных отклонений тензора $\langle \hat{\alpha}(t) \rangle$ от нуля по сравнению с исходным состоянием связано с уменьшением числа звеньев в моделируемом кристалле с $m(0) = 1500$ до $m(t) = 710$: и происходит примерно пропорционально $1/\sqrt{m}$ (см. раздел 3.1.1). Отметим также, что и распределение дислокаций по семействам векторов Бюргера сохраняет свою однородность. Таким образом, в процессе релаксации дислокационная сетка остается в целом нейтральной. Нейтральность сетки приводит к тому, что далекодействующие упругие поля напряжений отдельных звеньев компенсируют друг друга и оказывают слабое влияние на их движение по сравнению с линейным натяжением. Это важное обстоятельство позволяет как и в случае плоской сетки [2] не учитывать при моделировании взаимодействия звеньев через поля упругих напряжений, что существенно уменьшает затраты компьютерного времени. Чтобы подтвердить данный вывод, проводили расчет поля напряжений $\hat{\sigma}$, действующего в середине каждого звена сетки со стороны всех других звеньев, по формуле Пича-Келера [10] определяли силу, действующую на данное звено P_G и сравнивали ее с силой $P_E = E_t/l$, соответствующей напряжению старта источника Франка-Рида в приближении линейного натяжения с длиной, равной длине l рассматриваемого звена.

Расчеты показали, что $P_G/P_E < 0,5$ примерно для половины звеньев и $P_G/P_E < 1$ для $\approx 75\%$ звеньев (Рис.9).

Теория релаксации трехмерной дислокационной сетки
Пространственно однородный случай

Компьютерные исследования релаксации трехмерной первоначально однородной случайной сетки показали, что этот процесс удобно разделить на три стадии. На первой, самой короткой стадии, которая длится от начального момента $t=0$ до $t=t_e$ ($\rho(0)/\rho(t_e) \approx \sqrt{3}$) кинетика релаксации определяется топологическими свойствами исходной сетки. На второй стадии $t_e < t < t_\varphi$ ($\rho(0)/\rho(t_e) \approx 3$) функция распределения длин звеньев сетки $\rho(u, t)$ принимает асимптотический вид $\rho(u)$ не зависящий от начального распределения $\rho(u, 0)$, но топология сетки меняется, что выражается в изменении функции распределения углов между звеньями в одном узле $g(\varphi, t)$. На третьей стадии $t > t_\varphi$ возникает топологически стационарная структура для которой $\rho(u)$ и $g(\varphi)$ имеют асимптотический вид, не зависящий от свойств исходной сетки. Как видно из данных моделирования представленных выше третья стадия вполне удовлетворительно описывается теорией Лагнеборга, причем с результатами компьютерного эксперимента согласуются не только итоговые зависимости, но и соотношения положенные в основу теории, не имевшие достаточно убедительного физического обоснования (1) - (3).

Для разработки теории релаксации дислокационной сетки на второй стадии необходимо записать кинетическое уравнение типа (1) и соотношения аналогичные (2) и (3) для функции $g(\varphi, t)$ и решать их совместно с уравнениями (1) - (3). Сделать это пока что не удалось и в данной работе мы постараемся так видоизменить теорию Лагнеборга, чтобы добиться удовлетворительного согласия с компьютерным экспериментом. Согласно его результатам соотношение (2) выполняется (см. рис. 7), а соотношение (3) для скорости изменения длины звена сетки не выполняется (см. рис. 8). Нетрудно убедиться, что зависимости $\rho(t)$ и $\rho(\bar{e})$ будут совпадать с наблюдаемыми (12) (см. рис. 5, 8) и (10) (см. рис. 6), если выбрать выражение для $\frac{d\bar{e}}{dt}$ в виде:

$$\frac{d\rho}{dt} = - \left(\frac{\bar{\rho}(0)}{\rho} \right)^2 M E_t \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_0} \right). \quad (15)$$

Решая систему уравнений (1), (2), (15) методом Лифшица-Слезова [7], находим зависимость ρ_0 от времени

$$\rho_0^4(t) - \rho_0^4(t_e) = 0,47 M E_t \rho_0^2(t_e) (t - t_e), \quad (16)$$

среднее значение $\bar{\rho} = 1,03 \rho_0$ и функцию

$$\rho(u) = \begin{cases} \frac{3^5 (e^{3/4})^z e^{-\frac{1}{3(1-u/u_0)}} e^{-\frac{1}{24\sqrt{2}} \arctg \frac{1+u}{\sqrt{2}}}}{4^4 (1-\frac{u}{u_0})^{55/24} ((1+\frac{u}{u_0})^2 + 2)^{35/24}}, & 0 \leq u \leq u_0 \\ 0, & u > u_0, \quad u_0 = 4/3, \quad z \approx 0,86 \end{cases} \quad (17)$$

график которой показан на рис. 3, 8.

Эта функция заметно отличается от найденной при моделировании.

В частности, по данным моделирования относительное число коротких звеньев значительно больше, чем по формуле (17). Это различие нетрудно объяснить, если обратить внимание на тот факт, что соотношение (3) в теории Лагнеборга имеет смысл, если длина звена ρ совпадает с радиусом кривизны ζ некой дислокационной ячейки. Если радиус кривизны ζ мал, то сила линейного натяжения велика и скорость изменения радиуса

ζ также велика, поэтому относительная доля ячеек малого радиуса ζ должна быть небольшой, что и дает формула (17). Если радиус ячейки ζ и ρ не совпадают, что очевидно часто реализуется (см. рис. 2), то малость длин одного или нескольких звеньев, образующих ячейку вовсе не определяет малость радиуса кривизны ячейки. Иначе говоря, могут часто наблюдаться ячейки с большим радиусом кривизны, которые образованы набором и больших и малых звеньев сетки. Таким образом, и функция распределения $\rho(u)$ теории Лагнеборга (4) и функция (17) строго говоря являются функциями распределения радиусов кривизны неких дислокационных ячеек. Можно обобщить теорию Лагнеборга и изложенную выше теорию на случай, когда подвижность дислокаций определяется разными механизмами массопереноса заменив в (3) и (15) коэффициент M на M/ρ^n , где $n=0$ соответствует объемной диффузии и $n=2$ трубочной диффузии [2]. Тогда уравнения изменения плотности дислокаций во времени (13) и (8) будут

иметь вид соответственно :

$$\frac{d\rho}{dt} = - \frac{\alpha ME t}{\rho(0)} \rho^{3+n/2}, \quad (18)$$

где $\alpha \approx 0,31$ и

$$\frac{d\rho}{dt} = - \alpha ME t \rho^{2+n/2}, \quad (19)$$

где $\alpha \approx 0,16$

Функция распределения $\rho(u)$ для $n=2$ при $t_e < t < t_\varphi$ в элементарных функциях не выражается и может быть записана в виде [7]:

$$\rho(u) = \frac{1}{2} e^{-\psi/2} / g(u),$$

$$\psi = \int_0^u \frac{du}{g(u)}; g(u) = \frac{1}{5} (\gamma_0(u-1) - u^6); \gamma_0 = \frac{6^6}{5^5}. \quad (20)$$

Для $t > t_\varphi$ $\rho(u)$ при $n=2$ совпадает с (17).

Пространственно неоднородный случай

Как уже отмечалось во введении, реальные дислокационные структуры наиболее часто представляют собой пространственно неоднородные трехмерные сетки. Рассматривая дислокационную сетку как непрерывную неоднородную дислокационную среду, аналогично тому, как это было сделано для плоской сетки, можно получить следующие дифференциальные уравнения ее кинетики при различных механизмах массопереноса, обеспечивающих переползание дислокаций ($n=0$ - объемная диффузия, $n=2$ - трубчатая диффузия):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - ME t \left(\frac{\alpha \rho^{3+n/2}}{\rho(0)} + \frac{\beta}{\rho(0)} \rho^{1+\frac{n}{2}} \Delta \rho \right) \quad (21)$$

для $t_e < t < t_\varphi$ и

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - ME t \left(\alpha \rho^{2+n/2} + \beta \rho^{n/2} \Delta \rho \right) \quad (22)$$

для $t > t_\varphi$, $\beta = 1/3$.

Проведем анализ устойчивости трехмерной дислокационной среды при $n=0$ и $t > t_e$, также как это делалось в [2]. При $t_e < t < t_\varphi$ неоднородности с длиной волны:

$$\lambda_m \leq 2\pi \sqrt{\frac{\beta \rho(0)}{3\alpha \rho}} \rho^{-1/2} \quad (23)$$

могут нарастать. Подстановка α и β дает:

$$\lambda_m \leq 3\rho^{-1/2} \quad (24)$$

При $t > t_\varphi$

$$\lambda_m \leq 2\pi \sqrt{\frac{\beta}{2\alpha}} \rho^{-1/2} \approx 5\rho^{-1/2} \quad (25)$$

Уравнения кинетики дислокационной среды (21) и (22) имеют смысл только для неоднородностей с длиной волны $\lambda \gg \rho^{-1/2}$, так что граница неустойчивости λ_m , по-видимому, никогда не достигается и любые неоднородности затухают во времени, причем с наименьшей скоростью затухают неоднородности с наименьшей длиной волны. Эти выводы подтверждаются данными моделирования, которые показали, что первоначально хаотическая сетка, содержащая набор неоднородностей с любыми длинами волн устойчива. Никакие неоднородности в ней не нарастают, однако наблюдается фильтрация неоднородностей с длиной волны $\lambda \approx 4\rho^{-1/2}$, совпадающей с границей неустойчивости.

Анализ поведения других неоднородностей трехмерной дислокационной среды с помощью уравнений (21) и (22) будет проведен в последней части работы.

Сравнение результатов теории релаксации дислокационной структуры кристаллов при отжиге с экспериментальными данными

К сожалению, имеются лишь немногочисленные экспериментальные данные по детальному количественному исследованию эволюции дислокационной структуры металлов при отжиге. Наиболее полные из них получены Лагнеборгом [5] для трехмерной сетки. Построим экспериментальную зависимость плотности дислокаций от времени отжига [5] в координатах $1/\rho(t) - 1/\rho_0$ - время отжига t и $(1/\rho^2 - 1/\rho_0^2)$ - время отжига t (рис. 10, 2). Видно, что начиная с момента времени $t \approx 20$ часов, зависимость $(1/\rho^2 - 1/\rho_0^2) - t$ линейная. Экспериментальная функция распределения длин звеньев сетки $\rho(u, t)$ при этом меняется слабо и она достаточно хорошо согласуется с установившейся функцией распределения, найденной при моделировании (см. рис. 3, 6). Кроме того, начиная с

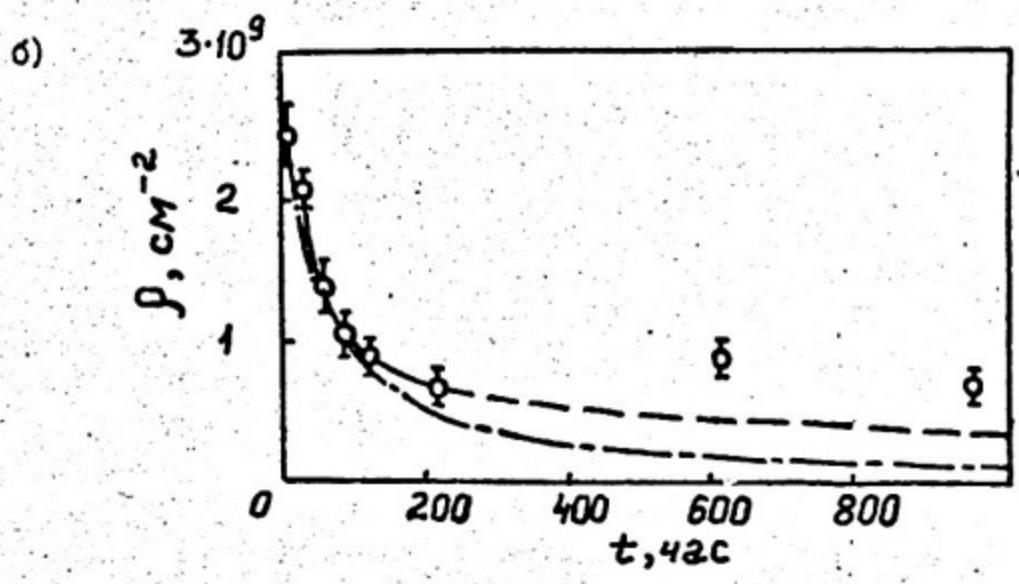
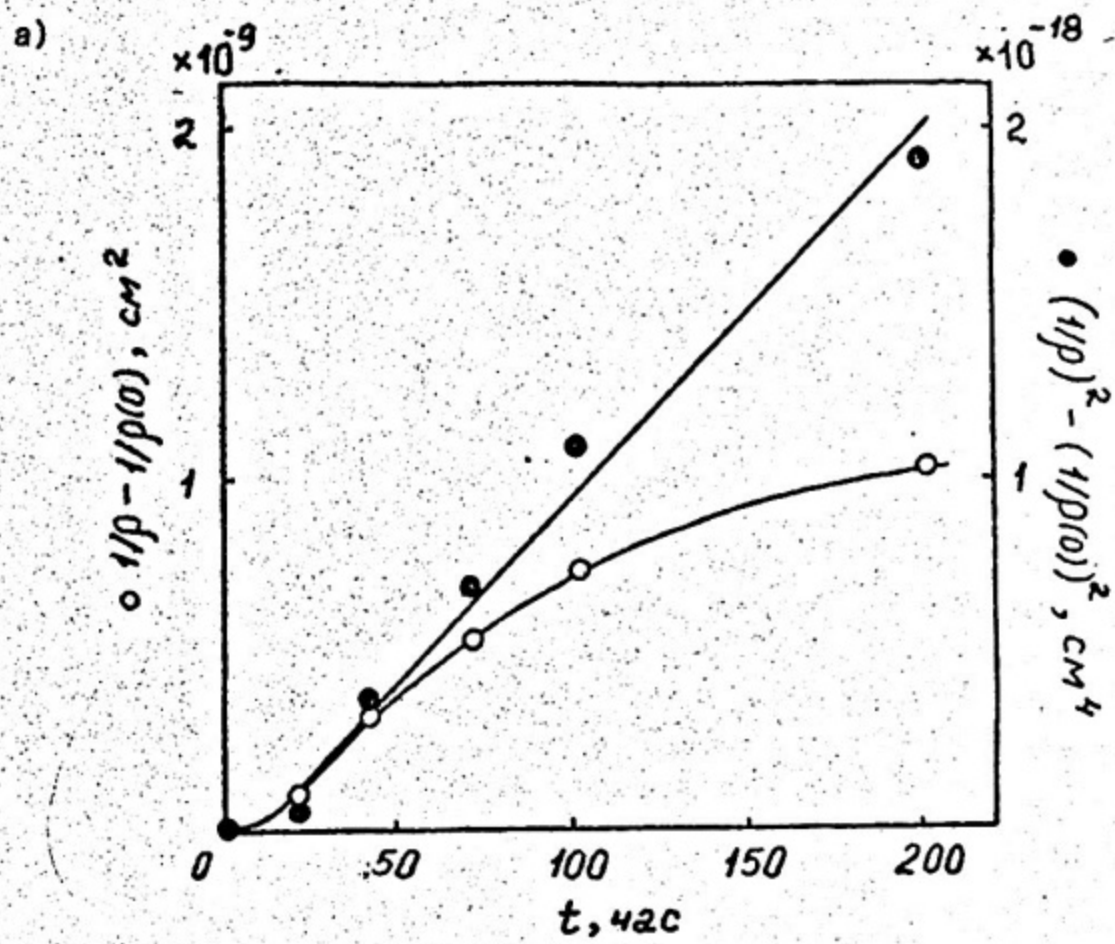


Рис. 10. Зависимости плотности дислокаций от времени отжига (○ — экспериментальные данные, [15], --- результаты моделирования, —•— теория Лагнеборга (9))

$t \approx 20$ часов, экспериментально определенные значения интеграла I_3 (2) остаются практически постоянными, а величина этого интеграла $I_3 = 1,3$ хорошо согласуется с найденным при моделировании $I_3 = (1,4 \div 6,3)$. Таким образом, момент времени $t \approx 20$ часов можно считать временем выхода на стационар функции распределения длин звеньев сетки $\rho(u)$, и, следовательно, с этого момента времени уменьшение плотности дислокаций описывается уравнением (13). На рис 10,8 показано изменение плотности дислокаций в соответствии с уравнением (13), при этом использовалась константа подвижности M , вычисленная в работе Лагнеборга. Видно хорошее согласие результатов нашей теории с экспериментальными данными. По результатам моделирования, после того, как плотность дислокаций уменьшалась примерно в три раза по сравнению с исходной плотностью дислокаций, процесс релаксации должен выходить на режим, описываемый теорией Лагнеборга. Для анализируемых здесь экспериментальных данных этот момент времени должен наступить для времен отжига больших $t = 200$ часов. Однако, надежные экспериментальные данные для отжига такой продолжительности в этой работе отсутствуют, но все же отметим, что теоретическая кривая, построенная в соответствии с уравнением (9), начиная с момента времени $t = 200$ час., лучше согласуется с экспериментом, чем в теории Лагнеборга [5]. Кроме того, скорость изменения плотности дислокаций по теории Лагнеборга в любой момент времени зависит только от ρ . Это находится в противоречии с результатами работы [11], где показано, что $d\rho/dt$ уменьшается с увеличением начальной плотности дислокаций $\rho(0)$ и это согласуется с уравнением кинетики отжига настоящей работы (13).

Заключение

1. Компьютерным моделированием обоснована правомерность использования приближения линейного натяжения для анализа кинетики релаксации нейтральной трехмерной дислокационной сетки и пренебрежения полями упругих напряжений дислокаций.
2. Проведено компьютерное моделирование релаксации трехмерной дислокационной сетки при отжиге. Показано, что имеются

два характерных времени t_e и t_φ ($t_e < t_\varphi$) установления стационарного вида функций распределения длин звеньев сетки и углов между звеньями сетки соответственно. При $t_e < t < t_\varphi$ кинетика отжига подчиняется уравнению:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\alpha_1 M E_t}{\rho(0)} \rho^3$$

и при $t > t_\varphi$:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\alpha_2 M E_t \rho^2.$$

3. Проведена проверка основных положений, лежащих в основе теории отжига Лагнеборга, по данным компьютерного моделирования. Показано, что при $t_e < t < t_\varphi$ можно добиться удовлетворительного согласия компьютерных расчетов и аналитической теории, если записать уравнение для скорости изменения длины звена сетки в виде:

$$\frac{d\ell}{dt} = -\left(\frac{\bar{\rho}(0)}{\ell}\right)^2 M E_t \left(\frac{1}{\ell} - \frac{1}{\ell_0}\right),$$

которое существенно отличается от аналогичного уравнения в теории Лагнеборга.

4. Используя математический аппарат теории Лифшица-Слезова, найдены асимптотические функции распределения длин звеньев сетки для случаев, когда переползание дислокаций обусловлено объемной и трубочной диффузией для $t_e < t < t_\varphi$ и $t > t_\varphi$.

5. Получены уравнения кинетики пространственно неоднородной трехмерной дислокационной сетки, имеющие вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{M E_t}{\rho(0)} (\alpha \rho^{3+n/2} + \beta \rho^{1+n/2} \Delta \rho)$$

для $t_e < t < t_\varphi$ и

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -M E_t (\alpha \rho^{2+n/2} + \beta \rho^{n/2} \Delta \rho)$$

для $t > t_\varphi$ ($n=0$ для объемной и $n=2$ для трубочной диффузии). Анализ этих уравнений показал, что пространственно однородная трехмерная сетка устойчива, и с течением времени любые малые неоднородности уменьшают свою амплитуду.

• Список литературы

- I. Горячев С.Б., Шаленков А.В. Релаксация дислокационной структуры при отжиге кристаллов. - I. Ансамбль прямолинейных бесконечных дислокаций. - М.: Препринт/МИФИ, 044-88, 1988. - 24 с.
2. Горячев С.Б., Шаленков А.В. Релаксация дислокационной структуры при отжиге кристаллов (Плоская дислокационная сетка). - М.: Препринт/МИФИ, 057-88, 1988. - 24 с.
3. Yong C.T., Henckley T. J., Lytton J. L. Dislocation substructure formed during the flow-stress recovery of high purity aluminium. - *Material Science and Engineering*, 1986, vol. 81, p. 391-407.
4. Morris M. A., Martin J. L. Microstructural dependence of effective stresses and activation volumes during creep. - *Acta metallurgica*, 1984, v. 32, N 10, p. 1609-1623.
5. Oden A., Lind E., Lagneborg R. Dislocation distribution during creep and recovery of a 20% Cr-35% Ni steel at 700°C. - In: Proc. of conf. CSSHTA, 1972, p. 60-66.
6. Займан Дж. Модели беспорядка: теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. - М.: Мир, 1982. - 592 с.
7. Слезов В.В., Сагалович В.В. Диффузионный распад твердых растворов. - *Успехи физических наук*, 1987, том. 151, вып. I, с. 67-104.
8. Hillert M. On the theory of normal and abnormal grain growth. - *Acta metallurgica*, 1965, vol. 13, N 3, p. 227-236.
9. Lagneborg R. A modified recovery-creep model and its evaluation. - *Metal science journal*, 1972, vol. 6, p. 127-133.
10. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. - М.: Атомиздат, 1972. - 600 с.
- II. Hausselt J., Blum W. Dynamic recovery during and after steady state deformation of Al-11%wt Zn. - *Acta metallurgica*, 1976, vol. 24, p. 1027-1039.