Bulletin of Science and Technical Development

www.vntr.ru № 2 (150), 2020

DOI: 10.18411/vntr2020-150-3

УДК 539.4

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ ДИСЛОКАЦИЙ В МЕТАЛЛАХ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

© Георгий Фёдорович Сарафанов [1], Федор Георгиевич Сарафанов [2]

[1]Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения <<Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук>>, Нижний Новгород, Россия

[2]Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

gf.sarafanov@yandex.ru

Аннотация. *В приближении двумерной среды для ансамбля подвижных винтовых дислокаций строится электродинамическая модель, описываемая уравнениями Максвелла*.

Ключевые слова: *дислокационный ансамбль, электродинамическая модель, уравнения Максвелла.*

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-02-00444).

ELECTRODYNAMIC MODEL OF DISLOCATION DYNAMICS IN METALS UNDER PLASTIC DEFORMATION

© G. F. Sarafanov[1], F.G. Sarafanov [2]

[1]Mechanical Engineering Research Institute RAS, Nizhny Novgorod, Russia

[2]National Research Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia

gf.sarafanov@yandex.ru

Abstract. *In the approximation of a two-dimensional medium for an ensemble of mobile screw dislocations, an electrodynamic model is constructed, described by Maxwell's equations.*

Keywords: *dislocation ensemble, electrodynamic model, Maxwell equations.*

Acknowledgements. *The work was supported by RFBR (project 18-02-00444)*

В деформируемом твердом теле пластическое течение является результатом движения элементарных носителей пластической деформации — дислокаций [1]. В общем случае перемещение дефектов происходит стохастично. Вследствие различного рода барьеров его можно характеризовать некоторым распределением по скоростям, причем функция распределения определяется как взаимодействием дефектов друг с другом, так и их самодействием и взаимодействием со средой. Это накладывает определенный отпечаток на многие процессы пластического деформирования.

При описании процессов эволюции дислокационного ансамбля необходимо определить уровень описания, который бы позволил достаточно строго и точно отразить эволюцию системы дислокаций. При этом необходимо учитывать дальнодействующий характер взаимодействия дислокаций друг с другом. Это предполагает, что теория должна быть в состоянии описывать такие процессы деформирования, в которых проявляются коллективные свойства дислокационной структуры. А также то, что дислокационный ансамбль в условиях деформирования материала представляет собой сильно неравновесную открытую систему, которая обладает выраженной активной генерационно - рекобинационной кинетикой.

В этой ситуации возникает потребность в построении континуальных уравнений для определенного класса модельных задач, где можно было бы на строгом математическом уровне учесть влияние волновых упругих полей на динамику дефектов кристалла.

В связи с этим в настоящей работе рассматриваются уравнения континуальной теории дислокаций, которые сводятся для ансамбля винтовых дислокаций к уравнениям, имеющим вид уравнений Максвелла.

Полная система уравнений динамики дислокаций должна содержать уравнения, описывающие поведение упругой среды с учетом влияния на нее дефектов, а также уравнения самих дефектов под действием сил. Уравнения упругой среды при наличии дислокаций имеют следующий вид [2, 3]:

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial v_k}{\partial t}, \quad \sigma_{ik} = \lambda_{iklm} w_{lm}, \tag{1}$$

$$e_{ilm} \frac{\partial w_{mk}}{\partial x_l} = -\alpha_{ik}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial v_k}{\partial x_i} = \frac{\partial w_{ik}}{\partial t} - j_{ik}. \tag{3}$$

Здесь ρ – плотность среды, v – скорость перемещения ее точек, λ_{iklm} – симметричный тензор упругих модулей, связывающий согласно закону Гука тензор упругой деформации ε_{lm} (или тензор w_{lm} дисторсии) с тензором напряжений σ_{ik}. Тензоры α_{ik} и j_{ik} – соответственно тензоры плотности дислокаций и плотности потока дислокаций, e_{ilm} – единичный антисимметричный тензор. Соотношение (2) вытекает в соответствии с теоремой Стокса из определения тензора плотности дислокаций [3]:

$$\int_S \alpha_{ik}\, dS = b_k, \tag{4}$$

которое требует, чтобы интеграл по поверхности, опирающийся на любой контур S, был равен сумме векторов Бюргерса b_k всех дислокационных линий охватываемых этим контуром. При этом тензор α_{ik} описывает непрерывное распределение дислокаций в кристалле.

Уравнение (3) учитывает реальное смещение элемента среды при наличии потока дислокаций и устанавливает связь с тензором упругой дисторсии w_{ik}. Из уравнений (2) и (3) вытекают ограничения, накладываемое на тензора α_{ik} и j_{ik}, . Условия совместности этих уравнений имеют вид

$$\frac{\partial \alpha_{ik}}{\partial x_k} = 0, \quad \frac{\partial \alpha_{ik}}{\partial t} + e_{ilm} \frac{\partial j_{mk}}{\partial x_l} = 0, \tag{5}$$

Последнее уравнение является дифференциальной формой закона сохранения вектора Бюргерса в среде [2, 3]. При заданных α_{ik} и j_{ik} система уравнений (1)-(3) является полной. Она дает возможность найти w_{ik} и v по любому заданному распределению дислокаций и их потоков.

Наиболее распространенным методом решения системы (1)-(3) при заданных α_{ik} и j_{ik} является метод функций Грина [2].

Продифференцируем (1) по времени и воспользуемся уравнением (3). Получим динамическое волновое уравнение теории упругости относительно вектора скорости v [2]

$$\rho \frac{\partial^2 v_i}{\partial t^2} - \lambda_{iklm} \frac{\partial^2 v_m}{\partial x_k \partial x_l} = \lambda_{iklm} \frac{\partial j_{lm}}{\partial x_k}. \tag{6}$$

Вектор $f_i = \lambda_{iklm} \partial j_{lm} / \partial x_k$ играет роль плотности силы в (6). Решение уравнения (6) можно представить в виде

$$v_i = \int \int_{-\infty}^{t} G_{ik}(r - r', t - t') f_k(r', t) dt, \tag{7}$$

где $G_{ik}(r,t)$ – тензор Грина динамического уравнения теории упругости [2]. Формула (7) решает задачу о нахождении скорости смещений и определяет временную зависимость смещений.

Аналогично можно получить динамические волновые уравнения и для других переменных, например, для тензора упругого поля $\sigma_{ik}(r,t)$. Учитывая (1)–(3), имеем

$$\rho \frac{\partial^2 \sigma_{ik}}{\partial t^2} - \lambda_{iklm} \frac{\partial^2 \sigma_{sm}}{\partial x_s \partial x_l} = \rho \lambda_{iklm} \frac{\partial j_{lm}}{\partial t}. \tag{8}$$

Интересен случай, когда дислокации в кристалле распределены так, что их суммарный вектор Бюргерса равен нулю и распределение дислокаций описывается тензором дислокационной поляризации P_{ik}. При этом плотность потока дислокаций выражается через тензор P_{ik} следующим образом [2, 4]

$$j_{ik} = -\frac{\partial P_{ik}}{\partial t}. \tag{9}$$

В этом случае волновое уравнение (8) преобразуется к виду

$$\rho \frac{\partial^2 \sigma_{ik}}{\partial t^2} - \lambda_{iklm} \frac{\partial^2 \sigma_{sm}}{\partial x_s \partial x_l} = -\rho \lambda_{iklm} \frac{\partial^2 P_{lm}}{\partial t^2}. \tag{10}$$

Волновые уравнения (6),(8) позволяют решать задачу в общем виде, однако реально это удается только для некоторых частных случаев из-за крайне сложной математической структуры тензора Грина. Поэтому выглядит естественным процедуру упрощения произвести уже на уровне исходных уравнений, используя векторную запись исходных переменных [5].

Рассмотрим модель, в рамках которой принимается, что смещение является скаляром, а тензор модулей упругости сводится к модулю сдвига G. При этом все тензоры второго порядка переходят в векторы, скорость среды в скаляр и система (1)-(3) принимает вид, характерный для теории электромагнитного поля

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = \mathrm{div}\,\sigma, \quad \sigma = Gw, \tag{11}$$

$$\mathrm{rot}\,w = -\alpha, \tag{12}$$

$$\mathrm{grad}\,v = \frac{\partial w}{\partial t} - j, \tag{13}$$

$$\mathrm{rot}\,\alpha = 0, \quad \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathrm{rot}\,j = 0, \tag{14}$$

Величины v, w объединяются в 4-вектор, для которого можно ввести два векторных потенциала A, Ψ согласно определению:

$$v = \mathrm{d}ivA, \quad w = -\mathrm{r}ot\Psi + \frac{1}{c^2}\frac{\partial A}{\partial t}, \tag{15}$$

где $c = \sqrt{G/\rho}$ – скорость упругих волн. Вид соотношений (15) подобран таким образом, чтобы автоматически удовлетворить первым двум уравнениям (1) для скалярной модели. Поскольку, как обычно, связь между полевыми величинами v, w и потенциалами A, Ψ инвариантна относительно преобразований

$$\Psi \to \Psi + \nabla\varphi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial a}{\partial t}, \quad A \to A - \mathrm{r}ota \tag{16}$$

с произвольными величинами φ, a то на потенциалы накладываем калибровочные условия

$$\mathrm{d}iv\Psi = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \mathrm{r}otA = 0, \tag{17}$$

После подстановки (15) в уравнения (12) (13) получаем два независимых уравнения для потенциалов

$$\Delta\Psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\alpha, \tag{18}$$

$$\Delta A - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = -j, \tag{19}$$

известные в теории поля [6].

Отметим, что данная полевая модель, строго говоря, не совпадает со стандартной теорией электромагнитного поля [6]. Так, если в последней используется 4-потенциал, то в изложенной теории – два векторных потенциала Ψ и A. Поэтому рассмотрим систему (11)-(14) в несколько иной постановке.

Далее будем полагать, что ансамбль винтовых дислокаций ($b \parallel l$) представляет собой систему прямолинейных дислокационных линий, упруго взаимодействующих между собой и с внешним упругим полем. Запишем систему (11)-(14) в новых переменных, полагая

$$E = [l \times w] = \frac{1}{G}[l \times \sigma], \quad H = -lv, \tag{20}$$

$$\alpha = (l\alpha), \quad J = [l \times j], \tag{21}$$

где l – единичный вектор, касательный к линии дислокации. В результате, учитывая цилиндрическую симметрию задачи (оператор $l\nabla$ переводит все переменные системы тождественно в нуль), имеем систему уравнений полностью аналогичную уравнениям Максвелла

$$\mathrm{rot}E = -\frac{1}{c^2}\frac{\partial H}{\partial t}, \tag{22}$$

$$\mathrm{rot}H = \frac{\partial E}{\partial t} + J, \tag{23}$$

$$\mathrm{div}E = \alpha, \tag{24}$$

$$\mathrm{div}H = 0, \tag{25}$$

где $c = \sqrt{G/\rho}$ – скорость распространения упругих волн. Условия совместности при этом принимают вид

$$(l\nabla)\alpha = 0, \quad \frac{\partial\alpha}{\partial t} + \mathrm{div}J = 0. \tag{26}$$

Первое уравнение (26) накладывает ограничение, обусловленное выбором симметрии задачи, второе – выражает закон сохранения дислокационного заряда (суммарного вектора Бюргерса).

Далее, выражая стандартным образом [6], переменные E, H через скалярный ψ и векторный A потенциалы

$$H = \mathrm{rot}A \tag{27}$$

$$E = -\nabla\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial A}{\partial t}, \tag{28}$$

и учитывая калибровку Лоренца

$$\mathrm{div}A + \frac{\partial\psi}{\partial t} = 0, \tag{29}$$

получим два независимых уравнения для введенных потенциалов

$$\Delta\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\alpha, \tag{30}$$

$$\Delta A - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = -J. \tag{31}$$

Полевые уравнения (30), (31) по форме совпадают с (18), (19), однако в отличие от векторной модели (11)-(14) имеют полную аналогию с электродинамикой. Исключение составляет двумерный характер системы уравнений, связанный с топологическими особенностями дислокаций как источников упругого поля. При этом источники поля α и J имеют характерный вид. Скалярная величина

$$\alpha(r,t)=\sum_a b_a\rho_a(r,t) \quad (32)$$

есть плотность дислокационного заряда (b – "элементарный" дислокационный заряд), а вектор

$$J(r,t)=\sum_a b_a\rho_a(r,t)v_a(r,t) \quad (33)$$

есть плотность дислокационного потока. Здесь ρ_a – скалярная плотность дислокаций, v_a – усредненная скорость дислокаций, r – радиус-вектор $(r\perp l)$, a – индекс, различающий дислокации по ряду признаков, в частности, по направлению вектора Бюргерса дислокации b по отношению к l $(b_a=\pm bl)$.

Несмотря на частный характер данной модели, она позволяет выявить основные качественные особенности динамики кристалла с дислокациями, а также построить схемы описания эволюции системы в более общей постановке.

Решение системы (30)–(31) можно стандартным образом представить в виде запаздывающих потенциалов. Для двумерного случая имеем

$$\psi(r,t)=\frac{1}{2\pi}\int\alpha\left(r',t-\frac{|r-r'|}{c}\right)\ln\frac{r_0}{|r-r'|}dr', \quad (34)$$

$$A(r,t)=\frac{1}{2\pi}\int J\left(r',t-\frac{|r-r'|}{c}\right)\ln\frac{r_0}{|r-r'|}dr'. \quad (35)$$

Введенный здесь потенциал упругого поля $\varphi(r,t)$ имеет непосредственный физический смысл, а именно сила $f_a=b_a\nabla\varphi$ есть сила, с которой ансамбль дислокаций действует на единицу длины дислокационной линии, имеющей "заряд" b_a.

Как известно, в электродинамике широко используется кулоновское приближение ($c\to\infty$) [2], которое по сути является самосогласованным приближением. В этом приближении для потенциала φ имеем

$$\varphi(r,t)=G\psi(r,t)=\frac{G}{2\pi}\int\alpha(r',t)\ln\frac{r_0}{|r-r'|}dr'. \quad (36)$$

Далее, учитывая, что для одиночной дислокации справедливо $\alpha(r)=b_a\delta(r)$ из (36) находим потенциал одиночной дислокации $\varphi_a(r)$ и энергию взаимодействия двух винтовых дислокаций

$$W_{ac}(r)=b_c\varphi_a(r)=\frac{Gb_ab_c}{2\pi}\ln\frac{r_0}{r}. \quad (37)$$

Последнее выражение хорошо известно в теории дислокаций [7]. Физически (37) означает, что ансамбль винтовых дислокаций обладает двумерным кулоновским потенциалом взаимодействия с цилиндрической симметрией.

Учитывая тот факт, что движение дислокаций является, как правило, нерелятивистским ($V<<c$) [8], представляется естественным исследование эволюции дислокационного ансамбля проводить именно в рамках самосогласованного приближения (или кулоновского для ансамбля винтовых дислокаций). В этом случае модель (22)–(25) редуцируется к уравнениям (24) и (26), самосогласованно описывающим эволюцию системы дефектов при

соответствующем задании материальных уравнений, связывающих потоки дислокаций с напряжением $\sigma = GE$.

Список литературы

1. Жирифалько Л. Статистическая физика твердого тела.- М.: Мир, 1975. -353с.
2. Косевич А.М. Дислокации в теории упругости.- Киев: Наук. думка, 1978.- 220с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. - М.: Наука, 1987. -287с.
4. Косевич А. М. Динамическая теория дислокаций // УФН. – 1964. - Т.84, Вып. 4. - С. 579-609.
5. Косевич А. М. Физическая механика реальных кристаллов.- Киев: Наукова Думка, 1981.- 328 с.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. - М.: Наука, 1960. -400с.
7. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. - М.: Атомиздат,1972. -599с.
8. Динамика дислокаций.- Киев.: Наук. думка, 1975.- 402 с.

Дата поступления: 8 февраля 2020 г.