

ЭЛЕМЕНТАРНОЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЕ СКОЛЬЖЕНИЕ КАК ОБЪЕКТ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

С. Н. Колупаева, Л. Е. Попов, М. И. Слободской

*Томский государственный архитектурно-строительный университет
634003, г. Томск, пл. Соляная, 2.
E-mail: ksn@tisi.tomsk.su*

Обсуждены вопросы, связанные с исследованием элементарного кристаллографического скольжения как необходимого этапа синтеза знаний о микромеханизмах пластичности кристаллических твердых тел. Обоснована необходимость привлечения к изучению явления скольжения методов имитационного компьютерного моделирования.

Макроскопическое формоизменение твердых тел, имеющих кристаллическое строение, может происходить двумя путями: 1) посредством диффузионного массопереноса по вакантным узлам или межузельному пространству кристаллической решетки; 2) бездиффузионным путем в результате кооперативных смещений атомов. Кооперативные смещения атомов в кристаллическом веществе имеют кристаллографический характер, они происходят в определенных кристаллографических плоскостях и направлениях и переводят кристаллическую решетку в решетку того же или другого типа. Если решетка после осуществления кооперативных смещений преобразуется в кристаллическую решетку другого типа, то говорят о деформации фазового превращения (или о мартенситном механизме деформации) [1-5]. Если в результате бездиффузионных смещений атомов кристаллическая решетка переходит в решетку того же типа, но зеркально симметричную исходной относительно некоторой кристаллографической плоскости, то говорят о деформации двойникования. И, наконец, в случаях, когда коллективное смещение атомов преобразует решетку в себя самоё, формоизменение кристалла называют деформацией скольжения [6].

Эти четыре вида деформации исчерпывают возможные типы микромеханизмов пластичности кристаллических тел. Все пластические формоизменения твердых тел без утраты ими кристаллического состояния и сплошности совершаются посредством диффузии или бездиффузионных фазовых превращений, двойникования и скольжения, а также различных комбинаций перечисленных микромеханизмов пластичности.

Деформации фазовых превращений, двойникования и скольжения обычно сопутствуют друг другу, обеспечивая достаточное число трансляционных и ротационных степеней свободы, чтобы формоизменение кристалла, задаваемое внешним деформирующим воздействием, могло произойти без нарушения сплошности деформируемого пластически кристалла. Так, при деформации фазового превращения необходимые повороты могут осуществляться в результате микродвойникования. При деформации скольжения необходимые для сохранения сплошности повороты осуществляются посредством деформации двойникования и (или) диффузионного массопереноса.

Диффузионная деформация всегда сопровождает деформацию скольжения. В отличие от бездиффузионных кооперативных смещений атомов при фазовой деформации и деформации двойникования смещения атомов при деформации скольжения происходят на вектор трансляции решетки, равный по модулю межатомному расстоянию в направ-

лении скольжения. Возникающие при скольжениях нарушения регулярного кристаллического строения имеют, поэтому, атомные размеры, по крайней мере, в одном измерении: это - экстраплоскости и ядра дислокаций, ряды межузельных атомов и вакантных узлов решётки, отдельные атомы, расположенные в межузельном пространстве и вакантные узлы.

Межузельные атомы и вакансии в условиях градиентов их концентраций, а также градиентов напряжений и температур, а в сплавах ещё и градиентов концентраций компонентов сплавов, возникающих при пластической деформации скольжения, совершают диффузионные перемещения на макро- и микроскопические расстояния, обеспечивая при этом диффузионный массоперенос и некристаллографическую составляющую пластического формоизменения [7-10].

Кристаллографическое скольжение в кристалле, содержащем дислокации систем, некомпланарных активной системе скольжения, порождает точечные дефекты [8, 9]. Изучение дислокационной динамики кристаллографического скольжения показало, что в процессе распространения кристаллографического скольжения дислокация на его фронте движется со скоростями, достигающими величин, близких к скорости поперечного звука [11, 12]. Движение быстрых винтовых дислокаций сопряжено с интенсивным производством вакансий и межузельных атомов [8, 9]. Обусловленный точечными деформационными дефектами массоперенос может достигать величин, соизмеримых с массопереносом, производимым собственно кристаллографическим скольжением [9].

Имеются многочисленные экспериментальные наблюдения поверхностной картины, связанной с пластичностью скольжения, которые свидетельствуют о значительных некристаллографических деформациях, сопутствующих кристаллографическому скольжению (волнистый характер следов скольжения, полосы сброса, не вполне кристаллографическая ориентация линий скольжения и др.). Деформация кристаллографического сдвига в чистом виде, по-видимому, вообще не может быть воспроизведена экспериментально (за исключением достаточно низких температур, при которых невозможны диффузионные перемещения наиболее подвижных точечных дефектов - межузельных атомов). Если даже деформирующее устройство таково, что оно обеспечивает возможность чистого сдвига, реальный наблюдаемый сдвиг всегда включает некоторую составляющую, обусловленную диффузионным массопереносом.

Интенсивность производства точечных дефектов при деформации скольжения зависит от уровня сил Пича-Келера, действующих на скользящие дислокации в локальных объёмах кристалла. Поэтому интенсивность диффузионного массопереноса наиболее велика вблизи концентраторов напряжений. Диффузионная пластическая деформация осуществляет аккомодационную деформацию там, где она необходима для сохранения сплошности деформируемого кристалла. Диффузионные аккомодационные деформации происходят с высокой точностью на любых масштабных уровнях от макро-скопического до атомного. Обладая бесконечным числом степеней свободы связанного с нею формоизменения, диффузионная деформация является универсальным механизмом релаксации напряжений, создаваемых деформирующим воздействием и вызванной им деформацией скольжения [9].

Следует подчеркнуть аккомодационную роль кристаллографического скольжения, связанную с порождением им сопутствующей диффузионной деформации. При достаточно высоких температурах диффузионный массоперенос обеспечивает ротационные составляющие деформации (поворот, изгиб-кручение), необходимые для отклика материала на моментные напряжения, возникающие в процессе реализации трансляционных мод деформации.

Пластичность скольжения есть результат кристаллографических скольжений (трансляционные моды деформации) и некристаллографических деформаций (включающих необходимые повороты и изгибы-кручения) [13, 14], обусловленных диффузи-

онным массопереносом [9]. Пластически деформируемое кристаллическое твёрдое тело самоорганизуется в многоуровневую иерархическую систему, в которой трансляционные и ротационные моды пластической деформации на различных масштабах и структурных уровнях находятся в неразрывной органической взаимосвязи [13-15]. Рассмотрение всей иерархии трансляций и ротаций в деформируемом кристаллографическом твёрдом теле составляет содержание новой научной дисциплины - физической мезомеханики. Основы концептуального, понятийного и математического аппарата физической мезомеханики заложены в работах академика В.Е.Панина и сотрудниками Института физики прочности и материаловедения РАН [13-15].

Возможность самоорганизации кристалла, деформация которого осуществляется скольжением, в иерархии трансляций и поворотов [13-17] имеет своим основанием тот факт, что кристаллографическому скольжению при не слишком низких температурах сопутствует аккомодационный диффузионный массоперенос. В температурном интервале вблизи абсолютного нуля, когда все точечные дефекты неподвижны, аккомодационные повороты осуществляются двойникованием или бездиффузионным фазовым превращением.

Благодаря сопутствующему ей диффузионному массопереносу деформация скольжения обладает большей способностью к аккомодации, чем деформация двойникования и мартенситного фазового превращения. Поэтому вовлечение деформации скольжения на поздних стадиях деформации фазового превращения и двойникования повышает ресурс пластической аккомодации кристаллического тела к деформирующему воздействию.

Таким образом, пластическая деформация скольжения явление наиболее распространённое при пластическом формоизменении кристаллов при механических воздействиях. Она часто выступает как основной или единственный способ формоизменения кристаллов и сопутствует в той или иной мере другим явлениям, лежащим в основе пластичности кристаллов. Поэтому исследование элементарных процессов пластичности скольжения есть необходимая составляющая познавательной и практической деятельности человека в области изучения пластичности и прочности кристаллических твёрдых тел.

С позиций теории сложных систем, к каковым, безусловно, относится деформируемое тело, путь к пониманию изучаемых явлений состоит в построении последовательности моделей. При этом методология такова, что подняться на следующий уровень, дающий более широкое, полное и точное его описание, можно только тогда, когда в достаточной мере изучен, понят и описан предыдущий уровень.

Для понимания природы пластичности кристаллов необходим промежуточный этап синтеза знаний о микромеханизмах пластичности на уровне единичного кристаллографического скольжения, при котором происходит относительное смещение частей кристалла по определенной кристаллографической плоскости и в определенном кристаллографическом направлении на наименьший вектор трансляции решетки в направлении скольжения. Такой выбор сделан, прежде всего, потому, что в условиях внешнего механического воздействия на кристалл именно на этом уровне действуют основные движущие силы микромеханики пластичности скольжения - силы Пича-Келера. При рассмотрении элементарного кристаллографического скольжения как единого целостного процесса может быть в полной мере реализован энергетический подход и применен закон сохранения энергии для получения необходимых характеристик, описывающих это явление.

Распространение элементарного скольжения в объёме кристалла осуществляется посредством перемещения его границы, общепринятой моделью которой, несомненно, упрощенной, является дислокация. При использовании такой модели, вышесказанное означает, что фронт скольжения, распространяющегося в объёме кристалла под дейст-

вием напряжений, созданных деформирующим воздействием, образует расширяющаяся замкнутая планарная дислокация (дислокационная петля). Поэтому динамика кристаллографического скольжения может рассматриваться как динамика связанной с ним дислокационной петли.

Естественным аппаратом для описания распространения элементарных кристаллографических скольжений является понятийный и математический аппарат микромеханики дислокаций, включая его статические, кинематические и динамические аспекты.

При изучении элементарных кристаллографических скольжений появляются трудности принципиального характера. Казалось бы, зарождение и распространение кристаллографического скольжения можно описать на основе уравнений динамики дислокаций. Однако уже описание конфигураций прогибающегося индивидуального дислокационного сегмента в отсутствие препятствий на основе дифференциального уравнения струны возможно лишь до достижения этим сегментом критической конфигурации (далее уравнение струны неприменимо). Кроме того, если бы такое описание было все же возможно, оно было бы применимо лишь для описания распространения элементарного кристаллографического скольжения в кристалле, в котором развивается единственное скольжение. В процессе распространения элементарного скольжения ограничивающая его расширяющаяся замкнутая дислокация пересекает десятки тысяч дислокаций других систем скольжения [9]. При контактном взаимодействии дислокаций возникают дефекты дислокации: пороги и перегибы, дислокации вступают между собой в дислокационные реакции. Кроме того, дислокации взаимодействуют с атомами растворенных элементов, частицами второй фазы и т.д. (препятствиями, стопорами). Разумеется, взаимодействие дислокации со стопором, оказывает влияние на ее взаимодействие с другими стопорами; то есть задача описания движения дислокации, осуществляющей кристаллографическое скольжение, является разновидностью проблемы многих тел, которая относится к числу неинтегрируемых. Аналитическое решение таких задач принципиально невозможно.

Кроме того, дислокации некопланарных систем скольжения, пересекающие плоскость скольжения, ориентированы и распределены в пространстве случайным (или ещё каким-либо) образом. Существуют, следовательно, сгущения дислокационных препятствий высокой прочности, которые могут оказаться непреодолимыми для скользящей дислокации. Учет случайности в расположении препятствий приводит к соответствующим теоретико-вероятностным проблемам, серьёзно усложняя и без того сложную задачу.

Многое дает реальный эксперимент. Но в обсуждаемых вопросах далеко не все деформационные дефекты структуры, формирующиеся в процессе деформации и осуществляющие ее, существуют в динамике и в сложных взаимодействиях. Экспериментатор же имеет дело с реликтовыми структурами, сохранившимися в материале после релаксационных процессов динамического возврата, и поэтому крайне сложно проследить динамические эффекты. Диаметр элементарных скольжений довольно велик по сравнению с межатомными расстояниями в кристалле: он составляет в реальных кристаллах от десятков до сотен микрометров [18, 19]. В этом проявляется основная трудность наблюдения элементарных кристаллографических скольжений с помощью методов просвечивающей электронной микроскопии. Эксперименты подобного рода уникальны и крайне редки [19]. С другой стороны, элементарные скольжения обычно много меньше, чем размеры деформируемого кристалла. Поэтому лишь небольшая часть элементарных скольжений выходит на поверхность кристалла.

Таким образом, многофакторность, сложность и линейные масштабы процесса распространения элементарного кристаллографического скольжения, а также высокая скорость этого процесса приводят к тому, что в настоящее время его не удаётся проследить

ни аналитическими, ни существующими экспериментальными методами. Приемлемым выходом из этой ситуации представляется воспроизведение распространения элементарного кристаллографического скольжения посредством машинных экспериментов, в частности методами имитации соответствующих процессов на ЭВМ. Постановка машинных экспериментов, как и постановка реального эксперимента, должна осуществляться на основе каких-либо принятых концепций (обоснованных для каждой конкретной задачи) или континуальных математических моделей.

Математическое моделирование пластических деформаций в кристаллах на основе математических соотношений, выражающих фундаментальные кристаллогеометрические, топологические и физические свойства деформационных дефектов кристаллической решетки, становится в настоящее время необходимой частью арсенала методов исследования явления пластичности кристаллов. Математические модели, достаточно полно отражающие механизмы возникновения деформационных дефектов, их движения, взаимодействия, аннигиляции позволяют исследовать явление пластичности кристаллов во всей области условий, в которой оно существует, включая такие условия деформирования, состояния кристалла и масштабы проявления пластичности, которые трудно или невозможно осуществить в реальном физическом эксперименте.

В 70-х годах в науке о пластичности кристаллов была осознана роль математического моделирования еще и как формализованного инструмента синтеза огромного объема знаний (в исходном их виде обычно разрозненных и фрагментарных) об элементарных механизмах, процессах и закономерностях пластической деформации в целостную картину пластического поведения кристаллов в условиях различных деформирующих воздействий [20, 21]. Были предприняты широкие коллективные системные исследования, направленные на синтез знаний о пластичности кристаллов. Это дало более глубокое понимание явлений, связанных с пластическим формоизменением кристаллических твердых тел.

Реальный и компьютерный (математический, вычислительный) эксперименты становятся двумя необходимыми взаимно-дополняющими сторонами единого экспериментального метода. Имитационное моделирование составляет для построения модели кинетики пластичности и деформационного структурообразования необходимые соотношения; например, для интенсивности генерации дислокаций в процессе сдвиговой деформации, соотношения для суммирования вкладов препятствий различной природы в деформирующее напряжение, полный набор геометрических параметров расширяющейся дислокационной петли и многое другое. Имитация на ЭВМ элементарного кристаллографического скольжения позволяет корректно поставить (иногда непосредственно увидеть) вопросы, требующие рассмотрения методами дислокационной динамики, возможно, в весьма упрощенных моделях. О допустимости тех или иных упрощающих предположений можно судить опять-таки на основе наблюдений за конфигурациями расширяющейся дислокационной петли.

Список литературы

1. Курдюмов Г.В. Бездиффузионные (мартенситные) превращения в сплавах // ЖТФ. - 1948. - Т. 18 - Вып. 8. - С. 999 - 1025.
2. Курдюмов Г.В., Хандрос Л.Т. Микроструктурные исследования кинетики мартенситных превращений в сплавах медь-олово. - // ЖТФ. - 1949. - Т. 19. - Вып. 7. - С. 761 - 768.
3. Лихачёв В.А. Кооперативная пластичность, обусловленная движением границ ориентации и границ раздела фаз // Изв. вузов СССР. Физика. - 1982. - № 8. - С. 83 - 102.

4. Материалы с эффектом памяти формы (справочное издание). Под общей редакцией В.А. Лихачёва - С. - Пб.: изд-во НИИХ СПбТУ, 1997. - 424 с.
5. Гюнтер В.Э., Дамбаев Г.Ц., Сысолятин П.Г. и др. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы. - Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1998. - 487 с.
6. Вернадский В.И. Явления скольжения кристаллического вещества. Ученые записки императорского Московского университета, ест. - ист. отдел, физико - кристаллографические исследования, М.: университетская типография, 1897. - 182 с.
7. Косевич А.М. Дислокации в теории упругости. - Киев: Наукова Думка, 1975. - 220 с.
8. Попов Л.Е., Пудан Л.Я., Колупаева С.Н. и др. Математическое моделирование пластической деформации. - Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1990. - 185 с.
9. Колупаева С.Н., Старенченко В.А., Попов Л.Е. Неустойчивости пластической деформации кристаллов - Томск: изд-во Томск. ун-та, 1994. - 301 с.
10. Могилевский М.А., Мынкин И.О. Влияние точечных дефектов на одномерное сжатие решетки // ФГВ. - 1978. - Т. 4, №5. - С. 159-164.
11. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Динамическое торможение дислокаций // УФН. 1975. - Т. 115. - № 1. - С. 3 -39.
12. Колупаева С.Н., Вихорь Н.А., Коротаяева Н.В., Попов Л.Е. Движение дислокаций при формировании полосы кристаллографического скольжения // ФММ. -1995. - Т. 80. - Вып. 4. - С. 51-57.
13. Панин В.Е., Лихачёв В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твёрдых тел - Новосибирск: Наука. Сиб. отд., 1995. - 229 с.
14. Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Данилов В.И. и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушения. - Новосибирск: Наука. Сиб. отд., 1990. - 225 с.
15. Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Елсукова Т.Ф., Иванчин А.Т. Структурные уровни деформации твёрдых тел. - Изв. вузов. Физика. - 1982. - № 6. - С. 5-27.
16. Панин В.Е. Современные проблемы пластичности и прочности твердых тел // Изв. вузов. Физика. - 1998. - Вып. 41. - №1. - С. 7-34.
17. Панин В.Е. Основы физической мезомеханики // Физическая мезомеханика. - 1998. - Т. 1, №1. - С. 5-22.
18. Mader S., Seeger A. Untersuchung des Gleitlinienbilds kubischflachen zentrierten Reinkristalle //Acta Met. - 1960. - Vol. 8 - N 4. - P. 513-522.
19. Steeds J.W. Dislocation arrangement in copper single crystals as function of strain // Proc. Roy. Soc. - A292. - 1966. - P. 343-373.
20. Попов Л.Е. Актуальные проблемы физики пластичности // Изв. вузов. Физика. - 1982. - №6. - С. 2-4.
21. Попов Л.Е., Кобытёв В.С., Ковалевская Т.А. Концепция упрочнения и динамического возврата в теории пластической деформации // Изв. вузов. Физика. -1982. - №6. - С. 56-82.