

## ФИЗИКА ПРОЧНОСТИ И ПЛАСТИЧНОСТИ

PACS numbers: 61.72.Bb, 61.72.Lk, 61.80.Ba, 62.20.fq, 62.40.+i, 81.40.Wx

### Генерація та рух дислокаційних перегинів під впливом зовнішнього імпульсного навантаження

І. М. Карнаухов, О. Є. Погорелов, М. С. Чернолевський\*

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,  
бульв. Акад. Вернадського, 36,  
03680, МСП, Київ-142, Україна*

*\*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
вул. Володимирська, 64,  
03033 Київ, Україна*

У рамках моделі Френкеля–Конторової розглянуто генерацію дислокаційних перегинів поблизу поверхні зразка металу під впливом зовнішнього імпульсного навантаження. Показано, що імпульсне навантаження генерує дислокаційні перегини, які утворюються поблизу поверхні і рухаються вглиб зразка, причому процес генерації має пороговий характер. Швидкість дислокаційних перегинів та величина порогу генерації залежать як від параметрів зразка, так і від амплітуди і тривалості імпульсу зовнішнього навантаження.

В рамках модели Френкеля–Конторовой рассмотрена генерация дислокационных перегибов вблизи поверхности образца металла под влиянием внешней импульсной нагрузки. Показано, что импульсная нагрузка генерирует дислокационные перегибы, которые образуются вблизи поверхности и движутся вглубь образца, причём процесс генерации имеет пороговый характер. Скорость дислокационных перегибов и величина порога генерации зависят как от параметров образца, так и от амплитуды и длительности импульса внешней нагрузки.

Within the frameworks of the Frenkel–Kontorova model, generation of dislocation kinks near the surface of a metal sample under the influence of external pulse loading is considered. As shown, the pulse loading generates dislocation kinks, which are formed near the surface and move depthward the sample, and the generation process is of a threshold nature. Velocity of dislocation kinks and a value of generation threshold depend on both sample parameters and pulse height and duration of external loading.

**Ключові слова:** структурні дефекти, масоперенесення, термічні напруги, імпульсний лазерний вплив.

(Отримано 10 січня 2013 р.; остаточн. варіант — 19 березня 2013 р.)

## 1. ВСТУП

Процеси масопереносу в металах, що піддаються зовнішнім імпульсним впливам з високою швидкістю деформації ( $\dot{\epsilon} \geq 1 \text{ с}^{-1}$ ) характеризуються великою глибиною (від десятків до сотень мкм) проникнення атомів з поверхні в зразок [1]. При зовнішніх імпульсних діях найбільш ймовірними переносниками маси на такі великі глибини за досить короткі часи впливу ( $10^{-8}$ – $10^{-6}$  с) є міжвузлові атоми (МА) [2]. Однак цей тип дефектів є термодинамічно нестійким і не може існувати самостійно досить тривалі часи, що могли б бути порівнянні навіть з малими часами імпульсного впливу та навіть з часами протікання релаксаційних процесів у реальних кристалах, зокрема, з кубічною ґраткою [3]. Реалізація релаксаційних процесів, викликана виникненням термічних напруг [4], здійснюється як за рахунок утворення дислокацій, в тому числі крайових [5] і їхніх комплексів, так і точкових дефектів, що генеруються при взаємодії дислокацій, що рухаються [6]. Взаємодія фронту хвилі термічних напруг із пружним полем дислокацій може приводити до руху дислокацій від поверхні всередину зразку, їхньому накопиченню і перебудові в комірчастій структурі [5, 7].

Пояснення цього явища вимагало нового підходу до опису адекватного механізму масопереносу, а саме: атоми «захоплюються» дислокаціями, що рухаються, і переносяться вглиб кристала [8]. Це дало можливість запропонувати модель, яка дозволила описати експериментально виявлені глибини масопереносу, що є характерними для швидкісної імпульсної деформації зразку. Ключовим моментом такої моделі є стійкий рух комплексу «дислокація + міжвузловий атом» у полі механічних напруг, що поширюються від збудженої імпульсом поверхні всередину кристала. Це передбачає перенесення атомів у заданому напрямку дислокацією, що рухається, на глибини, обумовлені часом існування комплексу «дислокація + міжвузловий атом». Проведені в роботах [9, 10] оцінки для пояснення експериментально виявлених глибин перенесення власних помічених атомів заліза показали спроможність механізму, що міг би бути заснований на запропонованій моделі. В той же час ця модель не дозволила пояснити й описати ряд експериментальних результатів (зокрема, особливостей переносу впроваджених атомів), одержаних при інших умовах імпульсного впливу [11].

Можливо, в явищі масопереносу, що відбувається в різко нестационарних умовах [12], як при імпульсній деформації кристалічної ґратки, визначальним є не тільки спрямування дислокацій фронтом хвилі напружень, але й особливості взаємодії МА з дислокацією

в процесі її руху. Адекватний опис такого процесу виявляється можливим лише з залученням розв'язку відповідного рівняння Френкеля–Конторової для дислокаційного перегину (ДП), що рухається [13]. Тому виникла необхідність як головну причину масопереносу виділити самі дислокації, які генеруються імпульсом енергії, та їх безактиваційний рух вглиб зразка з врахуванням впливу на це міжвузлового атому, розміщеного в ядрі дислокації. Цей підхід, застосований в попередніх наших роботах [14–17], дозволив спростити розгляд механізму масопереносу, який протікає на тлі ряду складних явищ в твердому тілі, що виникають під впливом енергетичного імпульсу.

Дана робота присвячена відповіді на питання про вплив параметрів лазерного імпульсу та зразку на генерацію ДП.

## 2. ТЕОРІЯ І РЕЗУЛЬТАТИ

Розглянемо генерацію (утворення) і рух ДП углиб від поверхні зразка. Термічно активовані процеси при цьому розглядатися не будуть, для них характерні інші, значно більші за порядком, характерні часи й, відповідно, менші характерні довжини. У якості зовнішнього поля будемо враховувати дію лазерного випромінення на поверхню зразка. Насамперед, розглянемо утворення ДП у полі лазерного випромінення. Даний процес є динамічним, тому будемо виходити з рівнянь, які описують динаміку ДП. Рівняння, які є найбільш адекватними для опису процесів, що нас цікавлять, випливають із теорії Френкеля–Конторової. Будемо вважати, що зсув  $n$ -го атома ґратки, по якій рухається ДП, описується добре відомим рівнянням Френкеля–Конторової [13]. Одиницею виміру часу, яка характеризує даний кінетичний процес, є величина  $\tau_0 = a/v_0$  (час, за який звукова хвиля пошириться на відстань, що дорівнює постійній ґратки  $a$ ; тут  $v_0$  — швидкість звуку); так, для заліза час  $\tau_0$  становить близько  $10^{-13}$  с.

Лазерний імпульс досить добре можна апроксимувати, враховуючи гаусовий розподіл у часі потужності лазерного випромінення. Рівняння Френкеля–Конторової зручно записати в безрозмірних величинах часу й координати:

$$\ddot{x}_n = -\sigma \sin(2\pi x_n / a) + (x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) + A e^{-\alpha(t-\tau/2)^2} e^{-\lambda x_n}, \quad (1)$$

де  $x_n$  — зсув атома в одиницях  $a$ ,  $t$  — час [в одиницях  $\tau_0$ ],  $\tau$  — час лазерного імпульсу [в одиницях  $\tau_0$ ],  $\sigma = \sigma_p / ak$  — відношення напруження Пайерлса до коефіцієнта пружності «пружинки»  $k$ ,  $\lambda$  — коефіцієнт затухання лазерного випромінення (чим він більше, тим менший приповерхневий шар поглинає лазерне випромінення),  $\alpha$  — параметр, обернено пропорційний до дисперсії розподілення по-

тужності випромінення в часі. Рівняння (1) з'являється в результаті обезрозмірювання:

$$m\ddot{x} = m \frac{a}{1} \frac{1}{(a/v_0)^2} \ddot{x}' = m \frac{(v_0)^2}{a} \ddot{x}',$$

де  $\ddot{x}'$  — похідна безрозмірної координати [в одиницях постійної ґратки  $a$ ] по безрозмірному часу [в одиницях  $\tau_0$ ], далі  $v_0 = a\sqrt{k/m}$ ,  $m\ddot{x} = m(v_0)^2 \ddot{x}'/a = ak\ddot{x}'$ , і, поділивши на  $ak$  і опустивши штрих, одержуємо (1).

Останній доданок в (1) ураховує наявність зовнішньої сили, що діє на ДП з боку лазерного випромінення; тут  $A$  — максимальна амплітуда поля випромінення. Цю силу, у випадку імпульсного лазерного впливу із просторовим однорідним розподілом поглиненого світлового потоку по перетину пучка  $q$ , можна описати, виходячи з закону Бугера–Ламберта

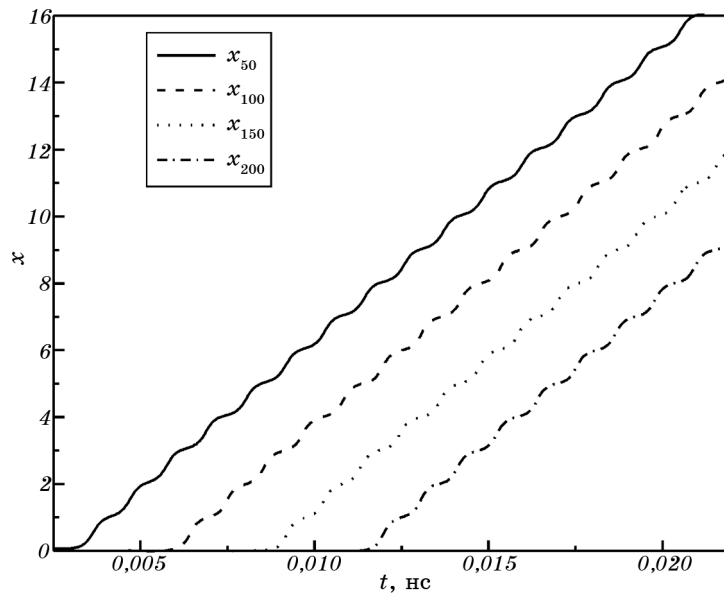
$$q(y) = Q(1 - R)\exp(-\delta y), \quad (2)$$

де  $\delta$  — коефіцієнт поглинання світла в металі,  $y$  — координата в напрямку поглинання,  $R$  — коефіцієнт відбиття матеріалу, величина  $Q$  — відповідає потужності лазерного випромінення, яке не призводить до плавлення поверхні, що опромінюється. Імпульс лазера опромінює макроскопічний об'єм зразка в напрямку, перпендикулярному до його поверхні, тобто  $\delta^{-1}/a \approx 10^3$ , тому на атомних масштабах його можна вважати постійним. У такому випадку імпульс світла може генерувати ДП, що рухаються як усередину зразка від його поверхні, так і до поверхні практично з однаковою ймовірністю. У цьому випадку поверхня зразка є виділеною для генерації ДП, спрямованих углиб кристала, оскільки на відстанях, віддалених від поверхні зразка, ДП, які генеруються зовнішнім лазерним випроміненням, взаємно анігілюють. Такий розгляд дозволяє нам надалі при чисельних розрахунках ураховувати зародження ДП тільки поблизу поверхні, при розрахунках цю область обмежено десятьма постійними ґратки, а саме  $n = 1, 2, \dots, 10$ , тому в розрахунках будемо вважати  $\lambda = 0,1$  (тобто така величина  $\lambda$  обмежує область генерації дислокацій поблизу поверхні зразка товщиною 10 постійних ґратки  $a$ ).

У результаті термічних флуктуацій може реалізуватися зсув атомів поблизу поверхні кристала на величину рівну постійній ґратки. Згідно з рівнянням Френкеля–Конторової у цьому випадку утворюється топологічний дефект, який з постійною швидкістю рухається усередину зразка, такого типу розв'язок описує бездисипативний рух ДП. У такому випадку процес генерації ДП відбувається флуктуативно, поверхня зразка в цьому випадку є джерелом

зародження ДП. Однак імовірність такого процесу природно мала, а сам процес утворення ДП є активаційним з великою енергією активації, тому зародження ДП реально реалізується тільки при наявності зовнішніх впливів. Таким чином, у полі зовнішніх напруг основною причиною генерації ДП є зовнішні поля, в нашому випадку обумовлені лазерним випроміненням, генерація ж ДП за рахунок термічних флуктуацій надалі не враховується, як процес, реалізація якого малоймовірна.

Розглянемо чисельні розв'язки рівняння (1), які описують генерацію й рух ДП при  $\sigma = 10^{-3}$ ,  $\lambda = 0,1$ ,  $\alpha = 8 \cdot 10^{-14}$ ,  $\tau_i \equiv \tau\tau_0 = 10$  нс,  $A/\sigma = 3,6$ . Співвідношення  $A/\sigma$  взято рівним 3,6 тому, що трохи менше цього значення знаходиться поріг генерації ДП при заданих інших параметрах (нижче якого генерації не буде). Розглянемо проходження ДП через певний вузол усередині кристала, наприклад через 50-й для даного набору параметрів. У результаті дії зовнішньої сили відбуваються зміщення атомів в 50-му вузлі (на рисунку це відповідає лівому краю суцільної кривої). Розглядається еволюція в часі цього стану, а саме — зсуву атомів у наступних шарах, який відповідає руху ДП усередину зразка. Через певний інтервал часу на 50-му вузлі знову реалізується зсув атомів на постійну ґратки, що природно приводить до утворення нового ДП і його руху вглиб зразка. Цей процес показано на рис. 1. Для ілюстрації цього проце-



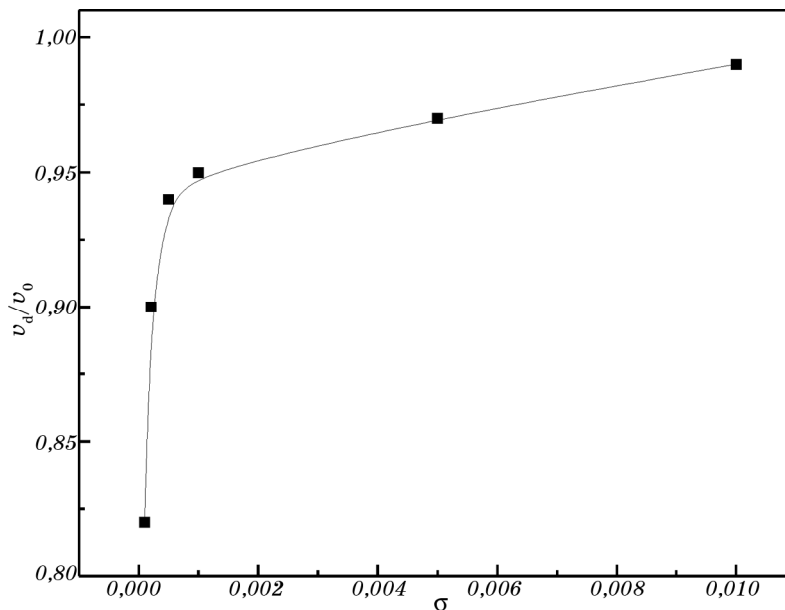
**Рис. 1.** Зсуви вузлів ґратки [в одиницях постійної ґратки], розраховані для наступних значень параметрів:  $\sigma = 10^{-3}$ ,  $\lambda = 0,1$ ,  $\alpha = 8 \cdot 10^{-14}$ ,  $\tau_i = 10$  нс,  $A/\sigma = 3,6$ .

су показаний також зсув атомів на 100-му, 150-му і 200-му вузлах ґратки (на рисунку ці криві позначені штрихованою, пунктирною і штрих-пунктирною лініями відповідно). Таким чином, відбувається генерація ДП у полі зовнішніх напруг. Щільність ДП при цьому визначається частотою їх генерації, як число ДП реалізованих на одиниці довжини зразка, відлічуваної перпендикулярно поверхні.

Дислокаційний перегин характеризується його півшириною  $l = \sqrt{[1 - (v_d/v_0)^2]}/\sigma$ . Вираз для півширини впливає з рівняння Френкеля–Конторової (без зовнішньої сили) і містить у собі «релятивістську» частину [6, 11]. Цей вираз стає невірним для нашого випадку, бо маємо зовнішню силу і вільну поверхню, а тому півширина розраховується чисельно, як відстань між вузлами, де зміщення більше половини від максимального, тобто більше половини постійної ґратки.

Розглянемо детально як залежить швидкість ( $v_d$ ) ДП, що утворюються, від різних параметрів, які входять в рівняння (1). Насамперед розглянемо залежність від напруги Пайерлса.

На рисунку 2 співвідношення  $A/\sigma$  взято рівним 6 абсолютно довільно (як приклад значення амплітуди зовнішнього імпульсу, при якому буде спостерігатися генерація ДП і можна розглянути залежність швидкості ДП від напруги Пайерлса). Як видно з рис. 2,



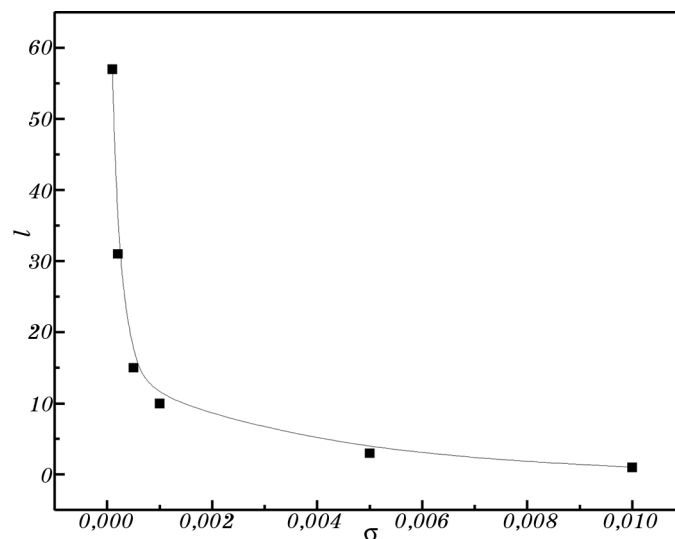
**Рис. 2.** Залежність швидкості ДП від відношення  $\sigma$ , розрахована для наступних значень параметрів:  $\lambda = 0,1$ ,  $\alpha = 8 \cdot 10^{-14}$ ,  $\tau_i = 10$  нс,  $A/\sigma = 6$ .

швидкість ДП, які утворюються в результаті дії лазерного імпульсу (ЛІ), суттєво зростає від 0,8 до 0,95 швидкості звуку в діапазоні напруг Пайерлса, який відповідає значенням  $\sigma = 0,0001-0,001$ . При напругах Пайерлса, які відповідають значенням  $\sigma = 0,001-0,1$ , швидкість ДП росте мало і має значення, трохи нижчі за швидкість звуку. Висновки з рис. 2 зробити легше, подивившись на наступний рисунок, на якому показано залежність напівширини ДП від відношення  $\sigma$ , яке пропорційне напрузі Пайерлса.

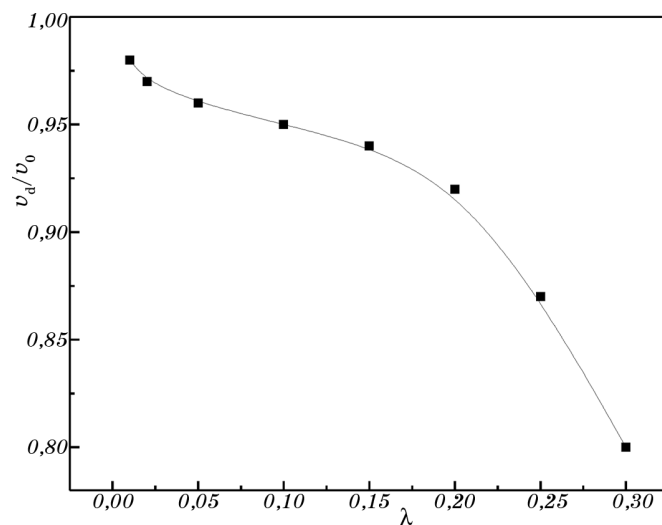
Як видно з рис. 3, напівширина ДП, які утворюються в результаті ЛІ, суттєво спадає в діапазоні відношень  $\sigma = 0,0001-0,001$ , від 60 до 10 постійних ґратки. При відношеннях  $\sigma = 0,001-0,1$  напівширина ДП спадає мало і знаходиться трохи нижче 10 постійних ґратки.

Отже, ми можемо зробити висновок, що більш повільні ДП, з великою напівшириною, утворюються при малих напругах Пайерлса, коли відношення  $\sigma$  не перевищують 0,001. Це означає слабкий зв'язок між шарами атомів в моделі Френкеля–Конторової.

Розглянемо залежність швидкості ДП від параметра  $\lambda$  у рівнянні (1). Як видно з рис. 4, швидкість ДП, які утворюються в результаті ЛІ, монотонно спадає в діапазоні  $\lambda = 0,01-0,3$ . Тобто, швидкі ДП ми одержуємо, якщо зовнішня сила ЛІ слабо спадає вглибині кристала (характерні величини спаду — сотні постійних ґратки), і навпаки, повільні, якщо сила ЛІ суттєво спадає на відстані кількох постійних ґратки.

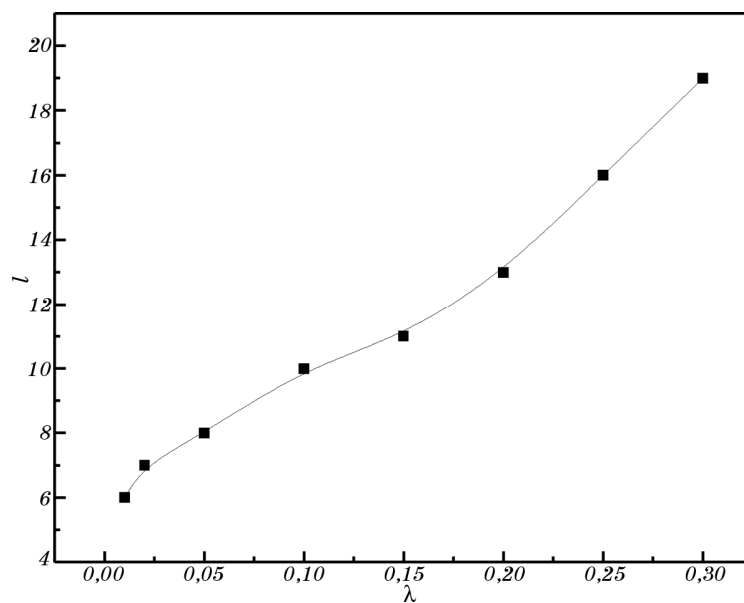


**Рис. 3.** Залежність напівширини ДП від відношення  $\sigma$ , розрахована для наступних значень параметрів:  $\lambda = 0,1$ ,  $\alpha = 8 \cdot 10^{-14}$ ,  $\tau_i = 10$  нс,  $A/\sigma = 6$ .



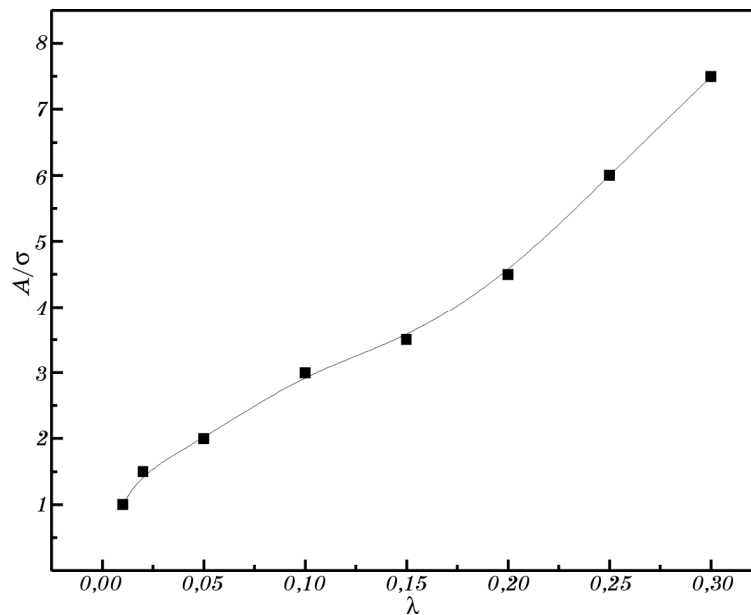
**Рис. 4.** Залежність швидкості ДП від  $\lambda$ , розрахована для наступних значень параметрів:  $\sigma = 10^{-3}$ ,  $\alpha = 8 \cdot 10^{-14}$ ,  $\tau_i = 10$  нс,  $A/\sigma = 6$ .

Тепер розглянемо залежність напівширини ДП від  $\lambda$ . Як видно з рис. 5, напівширина ДП, які утворюються в результаті ЛП, монотонно зростає в діапазоні  $\lambda = 0,01-0,3$ . Отже, ми можемо зробити



**Рис. 5.** Залежність напівширини ДП від  $\lambda$ , розрахована для наступних значень параметрів:  $\sigma = 10^{-3}$ ,  $\alpha = 8 \cdot 10^{-14}$ ,  $\tau_i = 10$  нс,  $A/\sigma = 6$ .





**Рис. 6.** Залежність мінімальної амплітуди зовнішньої сили від  $\lambda$ , розрахована для наступних значень параметрів:  $\sigma = 10^{-3}$ ,  $\alpha = 8 \cdot 10^{-14}$ ,  $\tau_1 = 10$  нс.

висновок, що більш повільні ДП, з великою напівшириною, утворюються при відносно великих  $\lambda$ , тобто при слабо проникаючому лазерному випромінненні.

За кадром поки що залишався не менш цікавий процес — пороговий процес утворення ДП при лазерному опромінненні зразка. Величини мінімальної амплітуди зовнішньої сили  $A$ , які приведуть до утворення ДП, залежать від  $\lambda$ . Під мінімальною зовнішньою силою розуміємо таку силу, при якій утвориться ДП (зсув атомів на одну постійну ґратки). Тож наведемо залежність мінімальної амплітуди зовнішньої сили від  $\lambda$  (оскільки нам зручно рахувати  $A$  в одиницях  $\sigma$ , наведемо графік в одиницях  $A/\sigma$ ).

Як видно з рис. 6, мінімальна амплітуда зовнішньої сили, яка потрібна щоб створювати ДП монотонно зростає з ростом  $\lambda$ . Це означає, що чим глибше лазерне випроміннення проникає в кристал, тим меншої потужності воно має бути для того, щоб створювати ДП.

### 3. ВИСНОВКИ

Одержані в роботі результати свідчать про суттєву залежність швидкості ДП від параметрів лазерного імпульсу та зразку. Швидкість ДП зростає з ростом напруги Пайерлса та спадає з ростом параметра  $\lambda$ , тобто із збільшенням затухання лазерного випроміннення у зраз-

ку.

Залежність порогу утворення ДП від параметра  $\lambda$  близька до прямої пропорційності — чим глибше лазерне випромінення проникає в зразок, тим меншої потужності воно має бути для того, щоб створювати ДП.

## ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Д. С. Герцрикен, В. Ф. Мазанко, В. М. Фальченко, *Импульсная обработка и массоперенос в металлах при низких температурах* (Київ: Наукова думка: 1991).
2. М. Е. Гуревич, Л. Н. Лариков, В. Ф. Мазанко, А. Е. Погорелов, В. М. Фальченко, *ФиХОМ*, № 2: 7 (1977).
3. М. Е. Гуревич, А. Ф. Журавлёв, Ю. В. Корнюшин, А. Е. Погорелов, *Металлофизика*, 7, № 2: 113 (1985).
4. В. В. Аполлонов, А. И. Барчуков, Н. В. Карпов, А. М. Прохоров, Э. М. Шефтер, *Квантовая электроника*, 2, № 2: 380 (1975).
5. П. Ю. Волосевич, А. Е. Погорелов, *Поверхность. Физика, химия, механика*, № 9: 126 (1986).
6. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций* (Москва: Атомиздат: 1972).
7. Л. Н. Лариков, Е. А. Максименко, А. Е. Погорелов, *Металлофизика*, 7, № 2: 116 (1985).
8. А. Е. Погорелов, *Направленный перенос атомов в железе и алюминии при импульсном лазерном воздействии* (Дис. ... канд. физ.-мат. наук) (Київ: Институт металлофизики АН УССР: 1985).
9. A. Pogorelov and A. Zhuravlev, *Defect and Diffusion Forum*, 194–199: 1247 (2001).
10. A. E. Pogorelov, K. P. Ryaboshapka, and A. F. Zhuravlev, *J. Appl. Phys.*, 92: 5766 (2002).
11. Д. С. Герцрикен, В. Ф. Мазанко, В. М. Тышкевич, В. М. Фальченко, *Массоперенос в металлах при низких температурах в условиях внешних воздействий* (Київ: РИО ИМФ: 2001).
12. A. Pogorelov, *Proc. of International Conf. 'ICFM 2009' (October 5–10, 2009)* (Partenit: 2001).
13. Я. И. Френкель, Т. А. Конторова, *ЖЭТФ*, 8, № 1: 89 (1938).
14. И. Н. Карнаузов, А. Е. Погорелов, М. С. Чернолевский, *Металлофиз. новейшие технол.*, 28, № 6: 827 (2006).
15. М. С. Чернолевський, *Космічна наука і технологія*, 12, № 5/6: 87 (2006).
16. И. Н. Карнаузов, А. Е. Погорелов, М. С. Чернолевский, *Металлофиз. новейшие технол.*, 29, № 6: 743 (2007).
17. И. Н. Карнаузов, А. Е. Погорелов, М. С. Чернолевский, *Металлофиз. новейшие технол.*, 34, № 2: 159 (2012).