

УЕДИНЕННАЯ ВОЛНА ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В АНСАМБЛЕ ДИСЛОКАЦИЙ

*И.Л.Максимов, Г.Ф.Сарафанов**

*Нижегородский государственный университет
603600 Нижний Новгород, Россия*

**Нижегородский государственный педагогический университет
603600 Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 21 ноября 1994 г.

После переработки 1 февраля 1995 г.

Рассмотрена нелинейная динамика возмущений плотности дислокаций и дислокационного заряда в рамках системы эволюционных уравнений. Обнаружено существование уединенной волны в дислокационном ансамбле: в виде перепада для суммарной плотности дислокаций, в виде солитона – для избыточной. Проведено исследование устойчивости полученных автомодельных решений. Найдена область значений параметров системы, где стационарные волновые решения устойчивы, а также спектр возможных значений для скорости распространения уединенной волны.

1. Введение. Описание закономерностей эволюции микроструктуры материала в ходе нагружения и ее связи с реологией пластического течения является одной из ключевых проблем физической теории прочности и пластичности. Одним из основных вопросов теории является объяснение наблюдающихся на опыте сложных закономерностей возникновения и развития дислокационных структур, формирующихся при пластической деформации материала. Несмотря на успехи, достигнутые в области экспериментальных исследований деформируемых твердых тел, до настоящего времени нет общепринятых представлений и тем более строгой количественной теории, позволяющей описать эти явления. Остаются, в частности, во многом неясными механизмы формирования полос скольжения, полос локализованного сдвига, полос Людерса, динамических дислокационных образований одного знака и т.д. [1-4]. Наряду с этим накоплено достаточно данных, позволяющих трактовать процессы пластической деформации с единых позиций – с точки зрения нелинейной динамики деформируемого кристалла [3]. Математически задача теоретического исследования указанных процессов может быть сформулирована на основе системы нелинейных эволюционных уравнений для плотности непрерывно распределенных дислокаций. При этом эволюционные уравнения являются следствием фундаментального закона сохранения вектора Бюргерса системы дислокаций, сохраняющим свое значение при различных дислокационных реакциях и размножении [5,6].

В настоящей работе для случая одной системы скольжения проводится детальное исследование динамики дислокационного ансамбля с учетом процессов генерации, рекомбинации и стока дислокаций на предмет нахождения автомодельных решений в виде уединенных волн плотности дислокаций.

2. Эволюционные уравнения. Дифференциальной формой закона сохранения вектора Бюргерса в кристалле является уравнение совместности $\partial \alpha_{ik} / \partial t + e_{iem} \partial j_{mk} / \partial x_l = 0$, связывающее тензоры плотности

$$\alpha_{ik} = \sum_j \tau_i b_k^j \rho_j$$

и потока

$$j_{ik} = e_{ijm} \sum_s \tau_j b_k^s \rho_s V_m^s$$

дислокаций [6]. Тензоры α_{ik} и j_{ik} выражаются через скалярную плотность дислокаций $\rho_s(\mathbf{r}, t, \vec{\tau})$, для которой из уравнения совместности с учетом процессов локального взаимодействия дислокаций может быть получена система эволюционных уравнений [5,7]:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \text{div} \rho_s \mathbf{V}^s = F_s(\rho_1, \rho_2 \dots) \quad (1)$$

Здесь \mathbf{V}^s – средняя скорость скольжения дислокаций, $\vec{\tau}$ – единичный вектор, касательный к линии дислокации, s – индекс, нумерующий возможное направление вектора Бюргерса \mathbf{b} дислокации. Нелинейные функции $F_s(\rho_1, \rho_2 \dots)$ описывают изменение плотности дислокаций в процессе их взаимодействия и удовлетворяют условию $\sum_s \tau_j b_k^s F_s = 0$, выражающему факт сохранения вектора Бюргерса в ходе этих процессов.

Практически при всех способах деформирования кристалла, за исключением ударных нагрузений, инерционные эффекты несущественны, поэтому движение дислокаций можно считать квазистационарным [5]. При этом средняя скорость дислокаций V^s алгебраически выражается через поля внешних, σ^e , и внутренних, $\sigma^i(\mathbf{r}, t)$, напряжений [2,5]. На начальном этапе деформирования материала $\sigma^i \ll \sigma^e$ и скорость дислокаций $V^s \simeq V^s(\sigma^e)$ можно считать постоянной [4,5]. В настоящей работе мы ограничиваемся рассмотрением именно этого случая.

Рассмотрим деформируемый кристалл, ориентированный для одиночного скольжения. В этом случае процесс пластической деформации развивается вдоль заданной системы скольжения. Поэтому будем считать, что в эволюции дислокационного ансамбля участвуют дислокации одного типа ($\vec{\tau} \parallel \mathbf{b}$), характеризующиеся плотностями $\rho_+(x, t)$ и $\rho_-(x, t)$ (и соответственно "зарядами" b и $-b$), которые движутся навстречу друг другу в параллельных плоскостях скольжения вдоль направления x с постоянными скоростями $v_+ = V$ и $V_- = -V$, размножаются по механизму двойного поперечного скольжения, участвуют в процессах аннигиляции и стока. С учетом указанных процессов система эволюционных уравнений (1) запишется в виде

$$\frac{\partial \rho_{\pm}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_{\pm} V_{\pm}) = A(\rho_+ + \rho_-) - c\rho_{\pm} - \kappa\rho_+\rho_- \quad (2)$$

Здесь A – коэффициент размножения дислокаций по механизму двойного поперечного скольжения, $\kappa \simeq 2hV$ – коэффициент аннигиляции (h – радиус захвата дислокаций в дипольные конфигурации), $c \simeq hV\rho_c$ – коэффициент стока дислокаций (в случае, если препятствия имеют преимущественно дислокационную природу, ρ_c – плотность неподвижных дислокационных комплексов).

Система (2) имеет два состояния равновесия: $\rho_+ = \rho_- = 0$ и $\rho_+ = \rho_- = (4A - c)/\kappa = \beta/\kappa = \rho_0/2$. Введем безразмерные переменные $n = (\rho_+ + \rho_-)/\rho_0$ и $m = (\rho_+ - \rho_-)/\rho_0$, характеризующие соответственно суммарную плотность дислокаций и дислокационный заряд. В безразмерных переменных (2) принимает вид

$$\frac{\partial n}{\partial t} + V \frac{\partial m}{\partial x} = \beta n(1 - n) + \beta m^2,$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} + V \frac{\partial n}{\partial x} = -cm. \quad (3)$$

3. Стационарные уединенные волны. Для системы (3) будем считать, что функции $n(x, t)$ и $m(x, t)$ удовлетворяют следующим краевым условиям: $n(-\infty, 0) = m(\pm\infty, 0) = 0$, $n(\infty, 0) = 1$. Данные условия фактически соответствуют началу процесса размножения дислокаций на правой стороне образца.

Решения системы (3) будем искать в классе автомодельных решений, полагая $m = m(x + ut)$, $n = n(x + ut)$. Подставляя решение предполагаемого вида в исходную систему (3), получаем систему уравнений относительно автомодельной переменной $\xi = x + ut$:

$$\begin{aligned} (1 - \gamma^2) \frac{dn}{d\xi} &= -\beta[\gamma n(1 - n) + \alpha m + \gamma m^2], \\ (1 - \gamma^2) \frac{dm}{d\xi} &= \beta[n(1 - n) + \alpha \gamma m + m^2] \end{aligned} \quad (4)$$

с граничными условиями $n(-\infty) = m(\pm\infty) = 0$, $n(\infty) = 1$. Здесь введены безразмерные параметры $\gamma = u/V$, $\alpha = c/\beta$. Система (4) имеет две неподвижные точки $(0, 0)$ и $(1, 0)$ на плоскости переменных (n, m) . Линеаризуя систему (4) вблизи состояния $(0, 0)$ и делая подстановку $n, m \sim \exp(\mu\beta\xi)$, получаем характеристическое уравнение, откуда находим

$$\mu_{1,2} = \frac{\gamma(\alpha - 1) \pm \sqrt{\gamma^2(\alpha - 1)^2 - 4\alpha(1 - \gamma^2)}}{2(1 - \gamma^2)}. \quad (5)$$

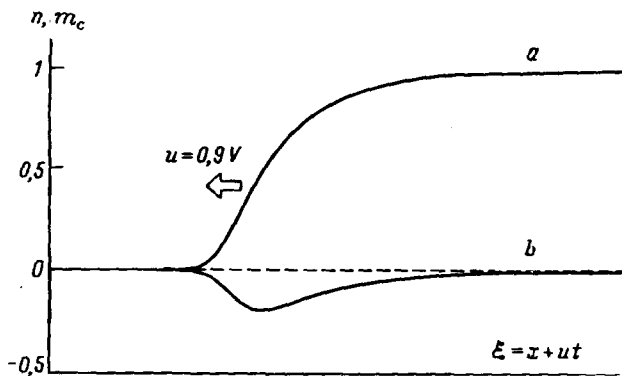
Так как плотность $n(x, t)$ не может быть отрицательной величиной, то $\gamma^2(\alpha - 1)^2 - 4\alpha(1 - \gamma^2) \geq 0$, откуда

$$\gamma \geq \gamma_{min} = 2 \frac{\sqrt{\alpha}}{1 + \alpha}. \quad (6)$$

Из (5) следует, что при $\gamma_{min} \leq \gamma < 1$ состояние $(0, 0)$ является узлом, причем, если $\alpha > 1$, - неустойчивым, если $\alpha < 1$, - устойчивым. Нетрудно показать, что вторая особая точка $(1, 0)$ при $\gamma^2 < 1$ является седлом, через которую проходят только две траектории. С учетом этих результатов можно построить фазовый портрет в окрестности особых точек и траекторию волнового решения системы уравнений (4), идущей из неустойчивого узла $(0, 0)$ в седло $(1, 0)$. Этой траектории соответствуют решения в виде бегущего перепада для $n(\xi)$ и импульса для $m(\xi)$, которые показаны на рисунке. Из анализа стационарных решений системы (4) следует, что распространение уединенных волн может происходить при $\alpha > 1$ со скоростью $u \in [u_{min}, V]$, где $u_{min} = 2V\sqrt{\alpha}/(1 + \alpha)$.

Рассмотрим предельный случай $\alpha \gg 1$. Если стоки имеют дислокационную природу, то нетрудно заметить, что $\alpha = \rho_c/\rho_0$, то есть физически рассматриваемый случай соответствует интенсивной иммобилизации дислокаций. Система (3) в этом случае сводится к уравнению относительно $n(x, t)$:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \beta n(1 - n) + D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}, \quad D = \frac{V^2}{c}. \quad (7)$$



a – Уединенная волна суммарной и *b* – зарядовой плотности дислокаций, соответствующая автомодельному решению системы уравнений (4) при значении параметров: $\alpha = 2, 5; \gamma = \gamma_{min}(\alpha) = 0, 9$

Это уравнение, известное как уравнение Фишера, впервые исследовалось в [8,9]. В работе [9] Колмогоров, Петровский и Пискунов доказали существование автомодельных решений бегущего типа $n(\xi) = n(x + ut)$ со спектром возможных значений скорости ограниченным снизу ($u \geq u_{min} = 2\sqrt{D\beta}$). Нетрудно заметить, что минимально возможная скорость распространения уединенной волны $u_{min} = 2V\sqrt{\alpha}/(1 + \alpha)$ переходит при $\alpha \gg 1$ в выражение $u_{min} = 2V/\sqrt{\alpha}$, полученное в [9] для уравнения Фишера. Качественно новый момент для системы (3) в отличие от уравнения Фишера заключается в том, что спектр возможных значений скорости есть континуум, ограниченный не только снизу, но и сверху величиной, равной скорости дислокаций, а также в том, что уединенный фронт волны существует только при достаточно большой плотности стоков ($\alpha > 1$).

4. Устойчивость автомодельных решений. Рассмотрим устойчивость стационарных решений $n_c(\xi)$ и $m_c(\xi)$ по отношению к классу возмущений, ограниченных конечной областью, например $[-L, L]$. Для этого решение исходной системы (3) ищем в виде

$$n(\xi, t) = n_c(\xi) + \delta n(\xi, t), \quad \delta n(\xi, t) = n_p(\xi)e^{\lambda t},$$

$$m(\xi, t) = m_c(\xi) + \delta m(\xi, t), \quad \delta m(\xi, t) = m_p(\xi)e^{\lambda t}.$$

Полагая возмущения δn и δm малыми, получаем задачу на собственные функции $n_p(\xi)$, $m_p(\xi)$ и собственные значения λ :

$$\frac{d}{d\xi}(m_p + \gamma n_p) = n_p[1 - \lambda - 2n_c] + 2m_p m_c,$$

$$\frac{d}{d\xi}(n_p + \gamma m_p) = -(\lambda + \alpha)m_p, \tag{8}$$

с граничными условиями $n_p(\pm L) = m_p(\pm L) = 0$. Делая подстановку

$$\psi(\xi) = (n_p + \gamma m_p) \exp \left\{ \frac{1}{2} \int p(\xi) d\xi - \frac{\gamma \xi (\lambda + \alpha)}{1 - \gamma^2} \right\},$$

где $p(\xi) = [\gamma(1 + \alpha) - 2(m_c + \gamma n_c)]/(1 - \gamma^2)$, систему (8) сводим к уравнению, имеющему самосопряженный вид:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + [H(\lambda, \xi) - U(\xi)]\psi = 0, \quad \psi(\pm L) = 0, \quad (9)$$

где

$$H(\lambda, \xi) = -[\lambda^2 + \lambda B(\xi)]/(1 - \gamma^2)^2,$$

$$B(\xi) = \alpha - 1 + 2n_c(\xi) + 2\gamma m_c(\xi),$$

$$U(\xi) = [\gamma^2(1 + \alpha)/4 - \alpha + q(\xi)]/(1 - \gamma^2)^2,$$

$$q(\xi) = \gamma(\alpha - 1)(m_c + \gamma n_c) + (2\alpha - 1)(1 - \gamma^2)n_c + (n_c + \gamma m_c)^2. \quad (10)$$

Изучение спектральных свойств задачи (9), где в отличие от стационарного уравнения Шредингера величина H квадратична по λ , относится к теории самосопряженных квадратичных пучков [10,11]. Как следует из этой теории [10], в том случае, если $B, U \geq 0$, спектр характеристических чисел пучка $L(\lambda) = -d^2/d\xi^2 - H + U$ лежит в левой полуплоскости, то есть $\text{Re } \lambda \leq 0$. При этом $\lambda = 0$ не является собственным значением задачи (9), поскольку возмущения $\delta n(\xi) = dn_c/d\xi$ и $\delta m(\xi) = dm_c/d\xi$, соответствующие этому значению, будучи определенными на всей действительной оси, не удовлетворяют граничным условиям $\delta m(\pm L) = \delta n(\pm L) = 0$. Это означает, что при выполнении условий $B, U \geq 0$ возмущения $\delta n(\xi, t)$ и $\delta m(\xi, t)$ экспоненциально затухают во времени и автомодельные стационарные решения являются асимптотически устойчивыми. Анализ операторов B и U , определяемых (10), показывает, что условия $B, U \geq 0$ имеют место при

$$\alpha > 1, \quad \gamma_{\min}(\alpha) \leq \gamma < 1, \quad (11)$$

где γ_{\min} определяется выражением (6).

5. Обсуждение результатов. Итак, проведенный анализ показывает, что система уравнений (3) с начальными условиями $n(x, 0) = n_c(x, \gamma)$ и $m(x, 0) = m_c(x, \gamma)$ ($\gamma \in [\gamma_{\min}, 1]$, $x \in R$) допускает автомодельное решение типа бегущей волны со скоростью $u = \gamma V$, устойчивое по отношению к классу возмущений, ограниченных конечной областью. При рассмотрении устойчивости стационарных решений по отношению к возмущениям, заданных на бесконечном интервале, возникает необходимость учета нейтральных мод сдвигового типа, которые для таких задач обычно нарушают асимптотическую устойчивость стационарных волновых решений [12,13]. При более естественных финитных начальных условиях, когда не возникает проблемы нейтральных решений, существенным является вопрос об оценке установившейся скорости распространения волны. Эта проблема для нелинейных уравнений параболического типа $y_t - y_{xx} = f(y)$ ($y \in [0, 1]$, $f(0) = f(1) = 0$) обсуждалась в литературе [9,14-16]. Установлено, что для выпуклых функций $f(y)$ переход от неустойчивого к устойчивым стационарным состояниям осуществляется при больших временах посредством волн переключения, скорость которых однозначно определяется линейной частью соответствующего уравнения [15,16]. В работе [17] было показано, что результаты аналогичного типа справедливы для более широкого класса задач, в частности, систем гиперболического типа.

Следуя работе [17], линеаризуем выражения (3), тогда для переменной $m(x, t)$ (или для $n(x, t)$) получаем уравнение

$$m_{tt} - V^2 m_{xx} + 2\sqrt{c\beta\delta} m_t = c\beta m, \quad \delta = \frac{\alpha - 1}{2\sqrt{\alpha}}, \quad (12)$$

которое по структуре совпадает с линеаризованным уравнением типа синус-Гордона, обсуждавшимся в [17]. Это позволяет применить полученный там результат к нашему случаю. Из решения уравнения (12)

$$m(x, t) \sim t^{-1/2} \exp \left\{ \frac{\sqrt{c\beta}}{V} \left(x + \frac{Vt}{\sqrt{1+\delta^2}} \right) \right\}$$

находим асимптотическую оценку для скорости волны

$$u = \left| \frac{dx}{dt} \right| \simeq 2V \frac{\sqrt{\alpha}}{1+\alpha} - \frac{V}{2\sqrt{c\beta} \cdot t}.$$

Можно заключить, что при $\alpha > 1$ для системы уравнений (3) начальные распределения $m(x, 0)$ и $n(x, 0)$, сосредоточенные на конечном интервале, развиваются в автомодельные бегущие решения $n_c(x + ut)$ и $m_c(x + ut)$ со скоростью $u = u_{\min} = 2V\sqrt{\alpha}/(1 + \alpha)$.

Обратимся к физическим приложениям модели. Из результатов работы следует, что если на момент начала размножения дислокаций плотность стоков ρ_c превышает начальную плотность подвижных дислокаций ρ_0 , то становится возможным распространение областей повышенной плотности дислокаций и дислокационного заряда в виде уединенных волн (см. рисунок) со скоростью $u \simeq 2V\sqrt{\alpha}/(1 + \alpha)$. В случае $\rho_c < \rho_0$ ($\alpha < 1$) распространение стационарных волн оказывается невозможным и решение исходной системы уравнений следует искать в классе нестационарных решений. В работе авторов [18] этот случай был рассмотрен при $\alpha = 0$. Из исходной системы уравнений было получено уравнение эволюции для избыточной плотности дислокаций (дислокационного заряда), которое при некоторых предположениях сводится к нелинейному уравнению Бюргерса. Для начальной задачи было показано, что в тех случаях, когда возникают эффективные условия для образования скоплений дислокаций одного знака, последующий их срыв и распространение принимают характер медленно затухающего ударного фронта в виде треугольной волны. Таким образом, в рамках исследуемой модели на начальной стадии деформации материала, когда плотность стоков мала, основным типом дислокационной структуры являются скопления дислокаций. По мере увеличения плотности стоков при достижении критического значения $\rho_c = \rho_0$ становится возможным возникновение нового типа субструктуры – полосы скольжения (области повышенной суммарной плотности дислокаций), развитие которой сопровождается распространением уединенной волны зарядовой плотности дислокаций. Данный вывод подтверждают экспериментальные исследования [19], согласно которым зарождению полос скольжения предшествует структура в виде разрозненных дислокационных скоплений, сформировавшихся на начальной стадии деформации.

Следует иметь в виду, что, вообще говоря, полосы скольжения являются двумерными образованиями, следовательно, строгое описание динамики роста и формы полосы скольжения должно быть достигнуто в последовательной двумерной постановке задачи. Последнее выходит за рамки данного сообщения и будет опубликовано отдельно.

Авторы признательны рецензенту работы за полезные замечания, а также за указание на ряд важных публикаций, имеющих отношение к рассматриваемой задаче.