

УДК 548.571

В. Г. Кононенко, Б. Кийбак

### ИССЛЕДОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ФОРМИРОВАНИЯ ДИСЛОКАЦИОННОГО АНСАМБЛЯ ВБЛИЗИ ПОРЫ, ЗАЛЕЧИВАЮЩЕЙСЯ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

#### Введение

Ранее в работах [1—4] были развиты представления о механизме и кинетике зарождения дислокаций вблизи поверхности поры, залечивающейся под давлением. Основная физическая идея, положенная в основу производящихся расчетов, заключалась в том, что пора испускает призматические дислокационные петли вакансионного типа.

Было вычислено [1, 2] пороговое напряжение по отношению к зарождению призматической петли с учетом изменений упругой энергии системы и поверхностной энергии поры. Такая модель не вызывает существенных возражений в приближении изотропного кристалла, где все участки призматической петли равнозначны. Существенно иная ситуация имеет место в реальном кристалле, где вследствие анизотропии имеются избранные плоскости легкого скольжения. В этом случае может оказаться, что залечивание поры обусловлено движением в плоскостях скольжения не призматических, а сдвиговых петель, которые, расширяясь и сталкиваясь, вдали от поры могут образовывать петли сложной конфигурации, определяемой ориентацией плоскостей скольжения. Очевидно, при таком механизме преодолевается менее высокий барьер и он может оказаться преимущественным.

Заметим, что аналогичные условия выноса пустоты путем дислокационного механизма реализуются и при вдавливании индентора в кристалл с тем, однако, не очень существенным отличием, что в случае индентирования петли опираются на поверхность, образуя незамкнутые сегменты, а в случае поры они замыкаются на поверхности поры.

#### Результаты эксперимента и их обсуждение

Эксперименты были выполнены на монокристаллах KCl, выращенных методом Киропулоса из сырья марки ХЧ, очищенного зонной плавкой, и содержащих одиночные поры ростового происхождения одного (примерно 100 мкм) размера. Для снятия возможных внутренних напряжений образцы длительное время отжигались при 700°С. Исходная плотность дислокаций в отожженных образцах не превышала  $10^5 \text{ см}^{-2}$ . Гидростатическое обжатие производилось в специальной прессформе в жидкой среде. После обжатия образцы раскалывались вдоль одной из плоскостей спайности, проходящей через центр поры или вблизи ее. Возникающая дислокационная структура обнаруживалась избирательным травлением.

Типичные фотографии дислокационных структур приведены на рис. 1. Первые дислокации появляются при пороговом давлении  $P^*$  (для

используемых нами кристаллов  $P^* = 150 \text{ атм}$ ) в плоскостях скольжения, близких к касательным к поверхности поры, и образуют плоские скопления (рис. 1, а, б). Характерная особенность дислокационной структуры состоит в отсутствии парного соответствия между дислокациями в параллельных плоскостях скольжения, симметричных относительно центра поры (рис. 1, а, б). Такое соответствие имело место, если бы испускаемые порой дислокационные линии представляли собой, как предполагалось в [1—4], призматические вакансионные петли.

Из расположения дислокаций (рис. 1, а, б) следует, что залечивание пор дислокационным механизмом происходит путем зарождения

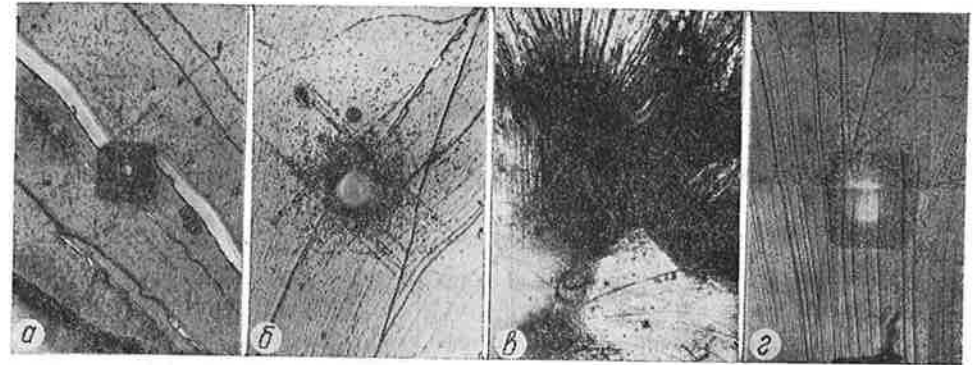


Рис. 1. Микроструктура монокристалла вблизи поры ( $\times 100$ ): а, б — дислокационные структуры в диагональной плоскости (100) при давлении  $P = 150 \text{ атм}$  и  $P = 160 \text{ атм}$  соответственно; в — розетка ступеней скола в диагональной плоскости (100) при  $P = 600 \text{ атм}$ ; г — дислокационная структура в плоскости (100), проходящей вблизи поверхности поры.

сдвиговых петель (во всяком случае при достаточно больших размерах пор), опирающихся на поверхность поры, что схематически представлено на рис. 2. Геометрия этих петель аналогична геометрии так называемых краевых петель, возникающих при индентировании [5], с той лишь разницей, что в случае индентирования — это полупетли, концы которых выходят на поверхность кристалла вдали от укола, а в нашем случае — это петли, замыкающиеся на поверхности поры. Краевые компоненты петель в плоскостях скольжения, обрамляющих контуры поры, в сумме эквивалентны призматической петле (в смысле выноса «пустоты» из поры).

Подтверждением того, что рождающиеся петли сдвиговые, является также наличие на поверхности скола своеобразной розетки ступеней скола (рис. 1, в), которые, как известно, зарождаются на выходах винтовых дислокаций [6], и наличие линий скольжения в плоскостях, проходящих мимо поры (рис. 1, г). Образование сдвиговых петель обусловлено, очевидно, тем, что независимо от механизма зарождения длина дислокационной линии сдвиговой петли критического размера  $R_s^*$  существенно меньше длины линии, в принципе возможной, призматической петли, радиус которой  $R_p$  должен быть равен радиусу контура максимальных сдвиговых напряжений, т. е. в приближении сферической поры в изотропном материале  $R_p = R/\sqrt{2}$  ( $R$  — радиус поры).

Действительно, при внешнем давлении  $P = 2 \cdot 10^8 \text{ дин/см}^2$  максимальные напряжения на поверхности сферической поры [1]  $(\sigma_{xy})_{\text{max}} = 0,75 P = 1,5 \cdot 10^8 \text{ дин/см}^2$  и критический радиус сдвиговой петли [6]  $R_s^* =$

$$= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{(\sigma_{xy})_{\max}} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ см} \quad (G = 5 \cdot 10^{10} \text{ дин/см}^2, \quad b = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$
  
 $\nu = 0,3)$ . т. е. значительно меньше  $R_p$ . Трудность образования и движения призматической петли в кристаллах типа NaCl связана еще и с тем, что такая петля должна была бы содержать участки малоподвижных линий в плоскостях типа (100), не являющихся плоскостями скольжения. Очевидно, в кристаллах, где возможно карандашное скольжение, последнее обстоятельство не существенно.

Из рис. 1, а, б также видно, что дислокации в скоплении распределены неоднородно — линейная плотность вдали от поры значительно

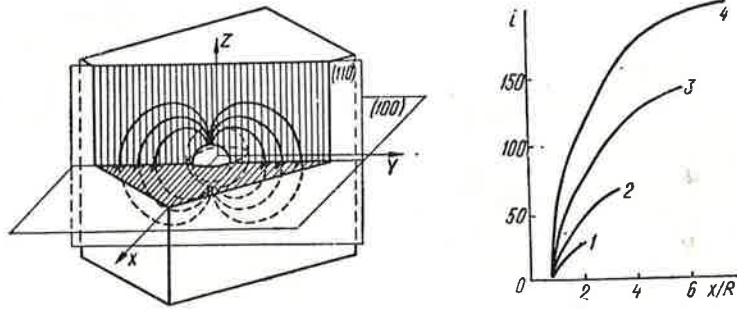


Рис. 2. Схема образования сдвиговых петель в одной из плоскостей скольжения.

Рис. 3. Расчетные зависимости при  $P = 1 \cdot 10^{-3} G$  (1),  $2 \cdot 10^{-3} G$  (2),  $4 \cdot 10^{-3} G$  (3) и  $6 \cdot 10^{-3} G$  (4).

меньше плотности дислокаций у ее поверхности. При увеличении давления длина скопления возрастает и появляются новые скопления (рис. 1, б).

Для количественного описания равновесной конфигурации плоского скопления в поле неоднородных сдвиговых напряжений, возникающих вблизи одиночной поры в кристалле под давлением, предположим, что это скопление состоит из ряда параллельных чисто краевых дислокаций, при этом мы пренебрегаем привязанностью дислокационных линий к поверхности поры и связанным с этим дополнительным напряжением  $\sigma_n$ , действующим на краевую компоненту.

Из оценки этого напряжения по соотношению  $\sigma_R \approx \frac{Gb}{2R}$  следует, что при  $R = 5 \cdot 10^{-3} \text{ см}$   $\sigma_R = 3 \cdot 10^5 \text{ дин/см}^2$ , что почти на два порядка меньше напряжения Пейерлса в кристаллах KCl. При расчете взаимодействие между скоплениями не учитывалось. Распределение дислокаций в скоплении, описываемое линейной плотностью  $\rho(x)$ , может быть в принципе определено путем решения интегрального уравнения равновесия скопления. Так как получить решение этого уравнения в аналитической форме невозможно, для определения равновесной конфигурации мы воспользовались моделированием процесса залечивания на ЭВМ. Во избежание усложнения и без того громоздких расчетов предполагалось, что пора сферическая и изменение радиуса при залечивании незначительно.

В состоянии равновесия сумма всех сил, действующих на  $i$ -ю дислокацию, равна нулю, т. е.

$$(\sigma_{xy})_i + \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{1}{x_k - x_i} + \sigma_p = 0, \quad (1)$$

$\sigma_p$  — напряжение Пайерлса,  $(\sigma_{xy})_i$  — сдвиговые напряжения, обусловленные внешней нагрузкой, в точке, где расположена  $i$ -я дислокация,  $x_k, x_i$  — координаты  $k$ -ой и  $i$ -ой дислокаций,  $N$  — общее число испущенных при данном давлении  $P$  дислокаций, определяющееся из условия

$$(\sigma_{xy})^s - \sigma_p = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \sum_{i=1}^N \frac{1}{x_i - \frac{R}{\sqrt{2}}}. \quad (2)$$

Поле сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  аппроксимировалось полем, возникающим вблизи сферической полости в изотропном теле под действием всестороннего давления [1], т. е.

$$\sigma_{xy} = \frac{3}{2} PR^3 \frac{xy}{(x^2 + y^2)^{5/2}}. \quad (3)$$

Процесс моделирования состоял в следующем.

1-й шаг — испускается первая дислокация и определяется координата  $x_1$  при помощи (1), т. е.  $(\sigma_{xy})_1 = \frac{3}{2} PR^3 \frac{x_1 y}{(x_1^2 + y^2)^{5/2}} = \sigma_p$ , где  $y = \frac{R}{\sqrt{2}}$ .

2-й шаг — испускается вторая дислокация и с учетом поля внешней нагрузки и поля первой дислокации определяется ее координата  $x_2$ .

3-й шаг — с учетом поля второй дислокации определяется новое положение первой —  $x_1'$ .

4-й шаг — с учетом  $x_1'$  определяется новое положение второй дислокации —  $x_2'$ .

5-й шаг — испускается третья дислокация и из (1) определяется ее координата  $x_3$  (с учетом полей первых двух).

Далее корректируются положения первой и второй дислокаций, после чего исправляется положение третьей дислокации, затем испускается четвертая дислокация и так далее. После каждого цикла вычисляется обратное напряжение скопления и, если условие (2) не выполняется, испускается очередная дислокация. При расчетах принималось  $\sigma_p = 2 \times 10^{-4} G = 10^7 \text{ дин/см}^2$ .

На рис. 3 результаты расчета представлены в виде зависимостей номера дислокации от безразмерного расстояния до центра поры  $x/R$  при различных давлениях.

Графическим дифференцированием этих графиков получены искомые распределения  $\rho\left(\frac{x}{R}\right) = \frac{\partial i}{\partial\left(\frac{x}{R}\right)R}$ , представленные на рис. 4. Данные эк-

сперимента (рис. 1, а, б) и расчета (рис. 3 и 4) удовлетворительно согласуются; например, при  $P = 150 \text{ атм}$  расчетная плотность на дальнем от поры конце скопления составляет примерно  $5 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$ , наблюдаемая — примерно  $9 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$ ; согласуется также общий ход экспериментальной и расчетной зависимостей  $\rho\left(\frac{x}{R}\right)$  на больших расстояниях от поры (рис. 4); вблизи поры, однако, наблюдается почти однородное распределение дислокаций. Очевидно, это объясняется тем, что экспериментально распределение дислокаций наблюдается после снятия давления, когда вследствие релаксации произошло их обратное движение. Заметим, что полученные расчетные данные в принципе применимы и при описании взаимодействия «краевых» петель, возникающих при индентировании, где также наблюдается [5] неоднородное распределение



дислокаций в лучах розетки и вдали от укола линейная плотность дислокаций в луче значительно меньше, чем вблизи.

Интересная особенность зависимостей  $\rho\left(\frac{x}{R}\right)$  состоит в наличии перегибов. Положение перегибов как раз соответствует тем расстояниям  $x_p$ , где  $\sigma_{xy} = \sigma_p$ , в чем легко убедиться, воспользовавшись (3). Основное количество дислокаций, эффективно участвующих в создании обратного напря-

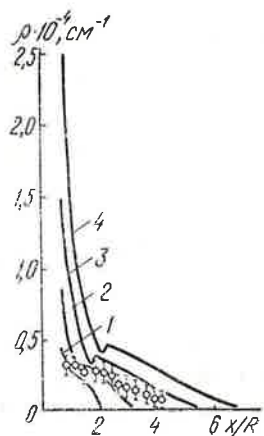


Рис. 4. Зависимости линейной плотности дислокаций в скоплении  $\rho$  от  $\frac{x}{R}$ . Обозначения кривых те же, что и на рис. 3. Точки получены по данным рис. 1, а, б.

жения (с учетом того, что обратное напряжение, созданное одной дислокацией,  $\sigma_{обр} \sim \frac{1}{x}$ ), сосредоточено в области  $x < x_p$ . Это оправдывает сделанное в [1, 2] предположение о том, что рождающиеся петли уходят от поры на расстояние, где  $\sigma_{xy} \approx \sigma_p$ .

На рис. 5 приведена расчетная зависимость общей длины скопления  $X/R$  от давления, общий ход которой хорошо согласуется с экспериментальной. Некоторое различие в численных значениях (порядка 20%), очевидно, связано с естественным разбросом значений напряжений Пайерлса в реальных кристаллах.

В заключение отметим, что в данной работе и теоретические расчеты, и обработка данных эксперимента проводились с использованием макроскопической константы, названной барьером Пайерлса. Имеется в виду некоторое эффективное напряжение  $\sigma_p$ , при котором дислокации становятся подвижными. Это напряжение, как известно, зависит от состава и состояния примесей в монокристалле, от исходной дислокационной структуры, наличия включений и т. д. Состав примесей и дефектная структура монокристаллов в этой работе специально не исследовались. Мы ограничились рассмотрением случая, когда перечисленные особенности реальной структуры влияют на наблюдаемую экспериментальную картину и на результаты расчета лишь в меру влияния на напряжение  $\sigma_p$ , величина которого для использованных нами кристаллов была ранее определена в [1].

Из выражений (1) — (3) видно, что с увеличением  $\sigma_p$ , при прочих равных условиях, уменьшается количество испускаемых дислокаций в любой полосе скольжения, а следовательно, уменьшаются длины скоплений и достигаемое при данном давлении изменение объема полости.

Авторы благодарят Я. Е. Гегузина за обсуждение результатов работы.

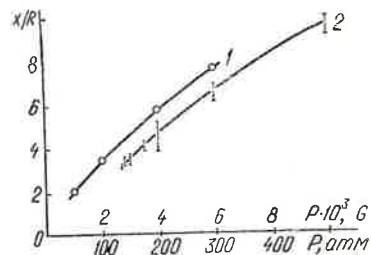


Рис. 5. Расчетная (1) и экспериментальная (2) зависимости длины скопления от давления.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Гегузин Я. Е., Кононенко В. Г. Дислокационный механизм изменения объема поры в монокристалле под влиянием гидростатического давления.— ФТТ, 1973, 15, № 12, с. 3550—3557.
2. Слезов В. В. Теория дислокационного механизма роста и залечивания пор и трещин под нагрузкой.— ФТТ, 1974, 16, № 3, с. 785—794.
3. Гегузин Я. Е., Кононенко В. Г., Чан Ван Тоан. О залечивании изолированной поры в монокристалле под влиянием давления всестороннего сжатия.— Порошковая металлургия, 1976, № 2, с. 26—32.
4. Гегузин Я. Е., Емец А. К., Кононенко В. Г. Дислокационный механизм формирования макроскопической полости в кристалле в очаге импульсного лазерного воздействия.— ФТТ, 1975, 17, № 10, с. 2984—2988.
5. Надежный Э. М., Степанов А. В. Искусственное сдвигообразование и дислокационная структура кристаллов хлористого натрия.— ФТТ, 1963, 5, № 4, с. 1006—1020.
6. Фридель Ж. Дислокации в кристаллах. М., «Мир», 1967. 643 с.

Харьковский госуниверситет  
им. А. М. Горького

Поступила в редакцию 17.I 1977 г.,  
в окончательном варианте—9.III 1977 г.

V. G. Kononenko, B. Kijbak

STUDIES IN THE INITIAL STAGE OF FORMATION  
FOR DISLOCATION CONFIGURATION NEAR  
A PORE HEALED UNDER PRESSURE

Summary

The initial stage of the dislocation structure formation near a pore is studied in a crystal under pressure. It is shown that at the beginning of healing shift loops forming flat accumulation are generated. The dependences are obtained for linear density of dislocation in an accumulation on the distance to the pore centre. The results of the calculation are in agreement with the experiment.