

MOŻLIWOŚCI OPISU UŚREDNIONEJ GĘSTOŚCI I ROZKŁADU DYSLOKACJI ZA POMOCĄ RÓWNAŃ DYFUZJI ZE ŹRÓDŁAMI

SYMON PILECKI (WARSZAWA)

Praca ma na celu wykazanie, iż uśrednione efekty przemieszczeń dyslokacji (i defektów punktowych) można opisać za pomocą równań dyfuzji z dodatkowymi źródłami dodatnimi i ujemnymi. Wychodząc z ogólnie znanych związków między odkształceniem plastycznym a przemieszczeniami dyslokacji, wskazano na analogie strumienia dyslokacji występującego w tych związkach, a strumieniem dyslokacji dryfujących pod wpływem zmiennych obciążeń. Podkreślono, że działanie obciążenia zewnętrznego jest równoważne działaniu gradientu potencjału chemicznego, a zatem następstwa (zmiennych) obciążeń mogą być opisane równaniem dyfuzji w postaci Onsagera. Omawiając możliwe postacie równań dyfuzji (Onsagera i Ficka) zwrócono uwagę na ich równoważność i wymiennność. Równie dobrze można korzystać z jednej lub z drugiej ich postaci, jeśli tylko prawidłowo ustali się warunki graniczne i wartości współczynników (ruchliwości lub dyfuzji). Wykorzystując przykłady skutków odwrotnej dyfuzji i rozpadu spinodalnego stopów wyrażono nadzieję na możliwość opisu złożonej struktury dyslokacyjnej za pomocą równań dyfuzji z dodatkowymi składnikami wyrażającymi bardziej złożone procesy. Sformułowano równanie dyfuzji ze źródłami i z uwzględnieniem m.in. oddziaływania powierzchni zewnętrznej metalu, umożliwiające obliczenie średniej gęstości dyslokacji lub defektów punktowych oraz ich przestrzennego rozkładu.

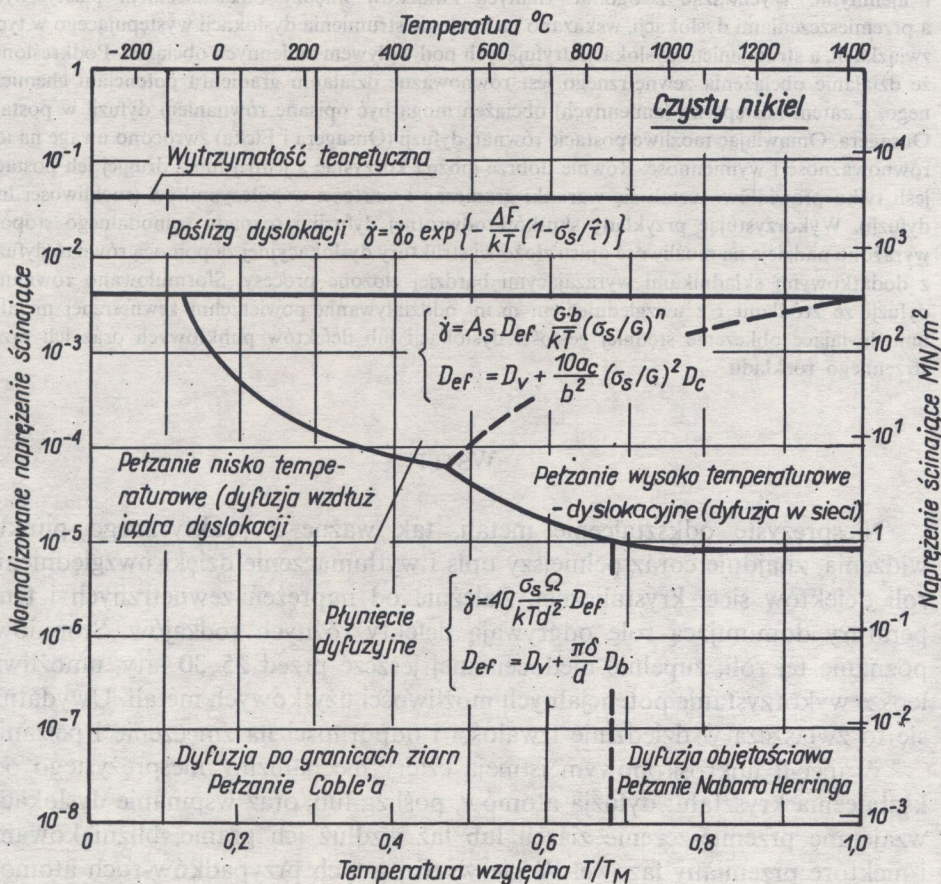
WSTĘP

Niesprężyste odkształcenie metali, tak ważne z praktycznego punktu widzenia, znajduje coraz pełniejszy opis i wytłumaczenie dzięki uwzględnieniu roli defektów sieci krystalicznej. Zależnie od naprężeń zewnętrznych i temperatury dominującą rolę odgrywają defekty różnych rodzajów. Stopniowe poznanie tej roli, zupełnie niedocenianej jeszcze przed 25-30 laty, umożliwia lepsze wykorzystanie potencjalnych możliwości użytkowych metali. Uwydatnia się to zwłaszcza w dziedzinie trwałości i odporności na zmęczenie i pełzanie.

W ujęciu mikroskopowym istnieją cztery mechanizmy niesprężystego odkształcenia kryształu: dyfuzja atomów, poślizg lub/ oraz wspinanie dyslokacji, wzajemne przemieszczenie ziaren lub faz wzdłuż ich granic, bliźniakowanie i niektóre przemiany fazowe. W pierwszym z tych przypadków ruch atomów jest wzajemnie nieskorelowany, w trzech pozostałych — skorelowany. Te podstawowe procesy mikroskopowe prowadzą do ukształtowania co najmniej

dwunastu różnych mikroskopowych mechanizmów odkształcenia [1], a prędkość odkształcenia w każdym z nich uwarunkowana jest różnymi czynnikami. Spośród tych możliwych mechanizmów odkształcenia, z naszego punktu widzenia, najważniejsze są mechanizmy związane z ruchem dyslokacji. Są to 1) odkształcenia wskutek czystego poślizgu dyslokacji, zależnego od oporu sieci, przeszkód dyskretnych i fononów; 2) odkształcenie wskutek poślizgu dyslokacji łącznie z dryfującymi punktami kotwiczącymi.

Istnieją już lub są opracowywane (względnie udoskonalane) metody analitycznego opisu procesów dominujących w poszczególnych przedziałach obciążeń zewnętrznych i temperatury oraz oceny występujących w nich prędkości odkształcenia polikryształów [2 i 3]. Bardziej zaawansowane rozwijanie tych metod umożliwia ocenę powstawania i rozwoju pęknięć oraz niebezpieczeństwa zniszczenia.



Rys. 1. Mechanizmy odkształcenia niesprężystego w różnych przedziałach temperatury i obciążeń [1 i 2]

We wszystkich zakresach temperatury i naprężeń, objętych wykresem na rys. 1, za wyjątkiem obszaru oznaczonego terminem „poślizg dyslokacji”, prędkość odkształcenia niesprężystego $d\gamma/dt$ opisywana jest równaniem dyfuzji lub dyfuzji pod naprężeniem (dryfu) i zależy od wydajności procesów transportu (atomów, wakansów, atomów międzywęzłowych). Podstawowe równania, które powinny być spełnione w poszczególnych przedziałach naprężeń i temperatury podane są na rysunku. W obszarze „poślizg dyslokacji” proces transportu powinien również mieć istotne znaczenie i wydaje się, że uwzględnienie go jest celowe. Sprawie tej poświęcone jest niniejsze opracowanie. Zajmiemy się w nim procesami przebiegającymi w umiarkowanej temperaturze i przy stosunkowo dużych naprężeniach zewnętrznych, zwłaszcza zaś przy naprężeniach cyklicznie lub stochastycznie zmiennych. Istnieją bowiem dokładne metody analizy poślizgu pojedynczych dyslokacji (np. [4]), jednak trudności opisu zachowania się ogromnych ilości dyslokacji występujących w kryształach w rzeczywistych warunkach ich obciążania skłaniają do poszukiwania takich możliwości.

1. ODKSZTAŁCENIE PLASTYCZNE A GĘSTOŚĆ I RUCH DYSLOKACJI

Jedną z podstawowych koncepcji w teorii dyslokacji, stosowanych w opisie procesu odkształcenia niesprężystego, jest pogląd, że całkowite odkształcenie plastyczne jest proporcjonalne do liczby dyslokacji, które przemieściły się w kryształach od początku procesu obciążenia

$$(1.1) \quad \gamma_p = \phi b \rho x,$$

prędkość zaś odkształcenia plastycznego $d\gamma_p/dt \equiv \dot{\gamma}_p$ jest proporcjonalna do strumienia dyslokacji [5] $J = \rho \bar{v}$ lub $J = \dot{\rho} x$.

W aspekcie prędkości dyslokacji zmiana odkształcenia plastycznego w czasie określona jest za pomocą wzoru

$$(1.2) \quad \dot{\gamma}_p = \phi b J = \phi b \rho \dot{x} = \phi b \rho \bar{v},$$

w aspekcie zaś wytwarzania nowych dyslokacji ruchomych — wzoru

$$(1.3) \quad \dot{\gamma}_p = \phi b J = \phi b \dot{\rho} x,$$

gdzie ρ oznacza gęstość dyslokacji ruchomych, \bar{v} ich średnią prędkość, x średnie przemieszczenie dyslokacji ruchomych, b wektor Burgersa oraz ϕ współczynnik geometryczny, zazwyczaj rzędu jedności, który w dalszych zapisach będziemy pomijać. Prędkość \bar{v} jest nieraz wyrażana jako iloczyn częstotliwości drgań dyslokacji i średniej ich drogi swobodnej oraz mnożnika probabilistycznego.

W początkowym etapie odkształcenia plastycznego zmiany strumienia dyslokacji kształtowane są zmianami średniej prędkości dyslokacji wywołanymi naprężeniem zewnętrznym. Dodatkowe efekty wywołane są wpływem wzrostu gęstości dyslokacji. W późniejszym etapie odkształcenia strumień dyslokacji zależy głównie od wytwarzania nowych dyslokacji ruchomych. Wypadkowa wartość $\dot{\gamma}_p$ w danej chwili określona jest więc wzorem uwzględniającym (1.2) oraz (1.3):

$$(1.4) \quad \dot{\gamma}_p = bJ = b(\rho\dot{x} + \dot{\rho}x).$$

Gęstość dyslokacji ruchomej stanowi zazwyczaj pewną część m gęstości całkowitej ρ_t :

$$(1.5) \quad \rho = m\rho_t,$$

przy czym m jest na ogół wielkością zmienną.

Podczas czystego poślizgu prędkość dyslokacji kształtowana jest przez siłę napędową F działającą na jednostkę długości dyslokacji [4]

$$(1.6) \quad F = \sigma b = (\sigma_z - \tau)b,$$

gdzie σ oznacza efektywne naprężenie ścinające, σ_z naprężenie zewnętrzne, τ naprężenie oporu oraz b wektor Burgersa. Naprężenie τ zależne jest od trzech czynników: oporu lepkości (tarcia) czyli naprężeń Peierlsa, tzn. od rodzaju kryształu; gęstości i rozkładu przeszkód dyskretnych; dodatkowego oporu fononów, wywołanego efektami relatywistycznymi przy prędkości dyslokacji zbliżonej do prędkości dźwięku.

Wartość prędkości dyslokacji może być różna, istnieje jednak określona dolna granica naprężenia, poniżej której średnia prędkość dyslokacji jest zerowa, przynajmniej w tym sensie, że wówczas odkształcenie plastyczne nie może być zarejestrowane za pomocą zwykłych mechanicznych stanowisk badawczych. Górną granicą prędkości dyslokacji jest prędkość sprężystej fali poprzecznej. Tak więc prędkość odkształcenia plastycznego również jest ograniczona.

Przy umiarkowanych obciążeniach zewnętrznych średnia prędkość dyslokacji, uwarunkowana oporem lepkości i uśrednionym oporem przeszkód, wynosi [4 i 6]

$$(1.7) \quad v = C \left(\frac{\sigma_z}{\sigma_0} \right)^n, \quad \sigma_z \gg \hat{\tau}, \quad 1 \leq n \leq 4,$$

gdzie C oraz n oznaczają stałe materiałowe, σ_z naprężenie zewnętrzne, σ_0 naprężenie wywołujące prędkość jednostkową oraz $\hat{\tau}$ maksymalne naprężenie oporu sieci.

Średnia prędkość \bar{v} może być też określona [23] ze wzoru

$$(1.8) \quad \bar{v} = A\sigma^m,$$

gdzie A oraz m są stałymi materiałowymi. Niektórzy autorzy uważają stałą m za parametr danego kryształu, wyznaczając jego wartość bezpośrednią metodą jamek trawienia lub pośrednią — z pomiarów prędkości odkształcenia przy obciążeniach cyklicznych.

W zakresie obciążeń i temperatur odpowiadających pełzaniu dyslokacyjnemu (rys. 1)⁽¹⁾ ruchliwość wakansów i atomów domieszkowych wzrasta na tyle, że poślizg dyslokacji występuje łącznie z kotwiczącymi je przeszkodami punktowymi [7]. Odkształcenie plastyczne jest wtedy możliwe przy naprężeniach mniejszych niż niezbędne do wywołania czystego poślizgu, w którym ruch dyslokacji następuje dopiero po pokonaniu oporu przeszkód. Podczas pełzania dyslokacyjnego ruch dyslokacji odbywa się więc z jednoczesnym wleczeniem atmosfer Cottrella, tzn. jego prędkość jest kształtowana przez prędkość dryfu tych atmosfer. Prędkość odkształcenia jest określona wtedy [1, 2 i 3] wzorem empirycznym

$$(1.9) \quad \dot{\gamma}_p = C \frac{D}{kT} Gb \left(\frac{\sigma}{G} \right)^n$$

gdzie D oznacza odpowiedni współczynnik dyfuzji, G moduł sprężystości poprzecznej, k stałą Boltzmanna, T temperaturę bezwzględną oraz σ naprężenie efektywne. Stała C w cytowanych pracach nie jest zdefiniowana, jednak przyjęta w [3] do przykładowych obliczeń jej wartość (dla czystego aluminium w układzie jednostek CGS $1,55 \cdot 10^8$) sugeruje, iż jest to gęstość dyslokacji, ewentualnie pomnożona przez ϕ , występujące w (1.1) — (1.3).

Według [24] wzór (1.9) jest prawdziwy nie tylko w zakresie pełzania dyslokacyjnego, lecz również i w innych odmianach pełzania, tzn. w całym możliwym przedziale obciążeń i temperatur; różnice sprowadzają się jedynie do różnych wartości stałych C , D oraz n , określonych odmiennymi wzorami. W pełzaniu dyslokacyjnym prędkość dyslokacji wynosi

$$(1.10) \quad v = \left(\frac{vb}{l} \right) b \exp \left(- \frac{Q}{kT} \right) \left[\exp \left(\frac{H}{kT} \right) - \exp \left(- \frac{\sigma H}{kT} \right) \right] = \\ = \frac{1}{l} D \sinh \frac{\sigma H}{kT},$$

gdzie v oznacza częstotliwość Debye'a, Q swobodną energię aktywacji dyfuzji rozpuszczanych atomów, $H = lb^2$ objętość aktywacji oraz l długość pętli dyslokacyjnej między punktami kotwiczenia.

⁽¹⁾ W różnych publikacjach, nawet tego samego autora, np. w [1] i [2], „pełzanie dyslokacyjne” jest również nazywane „pełzaniem wysoko temperaturowym”

Ponieważ $\sigma H \ll kT$, a $D = vb^2 \exp(-Q/kT)$, to równanie na prędkość dyslokacji sprowadza się do równania na prędkość dryfu wleczonych atomów:

$$(1.11) \quad v = \frac{D}{kT} \sigma b^2,$$

a prędkość odkształcenia plastycznego $\dot{\gamma}_p$ sprowadza się do postaci (1.9), jeśli $C = 6$ oraz jeśli $n = 3$.

Zwraca się uwagę, że właściwy współczynnik dyfuzji jest chemicznym współczynnikiem wzajemnej dyfuzji w stopie, określonym za pomocą wzoru DARKENA [25]

$$(1.12) \quad \tilde{D} = (c_1 D_2^* + c_2 D_1^*) \left(1 + \frac{\partial \ln f_1}{\partial \ln c_1} \right),$$

gdzie D_1^* i D_2^* są współczynnikami samodyfuzji izotopów pierwszego i drugiego składnika stopu, c_1 i c_2 stężeniami tych składników, a f_1 współczynnikiem aktywności pierwszego składnika.

Porównując wzór (1.9) z (1.2) otrzymujemy więc w pełzaniu dyslokacyjnym średnią prędkość dyslokacji:

$$(1.13) \quad v = \frac{DG}{kT} \left(\frac{\sigma}{G} \right)^n,$$

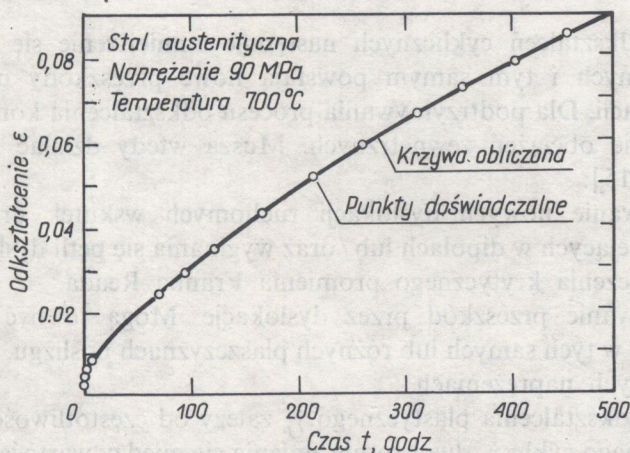
Jest ona kształtowana przez dryf atmosfer Cottrella.

Wzór (1.3) jest analogiczny do (1.7).

Wykorzystanie wzoru (1.13), tzn. funkcji prędkości odkształcenia plastycznego od zmian gęstości dyslokacji ruchomych, umożliwia opisanie nieustalonego pełzania dyslokacyjnego. Cottrell uwzględnił ruch dyslokacji już w pierwszej dyslokacyjnej koncepcji nieustalonego pełzania [9]. Przyjmował on jednak, że liczba (gęstość) dyslokacji ruchomych, istniejąca na początku procesu, z biegiem czasu zmniejsza się wskutek ich unieruchomienia. Nie uwzględnił natomiast możliwości rozmnażania dyslokacji podczas działania obciążeń zewnętrznych. Porównanie wyników doświadczeń z obliczeniami wykonanymi na podstawie tych koncepcji nie były zadowolające. Li [10] uwzględnił więc rozmnażanie dyslokacji ruchomych podczas ich przemieszczeń, jak również ich zanikanie wskutek anihilacji dyslokacji przeciwnych znaków lub unieruchomienie wskutek powstawania splotów dyslokacji poruszających się w dwu różnych płaszczyznach poślizgu. Procesy te Li, podobnie jak JOHNSTON i GILMAN [11], wyraził równaniem

$$(1.14) \quad \frac{d\varrho}{dt} = k_1 \varrho - k_2 \varrho^2,$$

gdzie ϱ oznacza gęstość dyslokacji ruchomych, a k_1 i k_2 — odpowiednio współczynniki rozmnażania i zanikania dyslokacji ruchomych, przy czym są one zależne od naprężenia i temperatury, lecz niezależne od gęstości ϱ .



Rys. 2. Obliczone i zmierzone prędkości odkształcenia podczas pełzania dyslokacyjnego stali austenitycznej [10]

Podstawiając prawą stronę równania (1.14) do (1.3) Li uzyskał wyniki obliczeniowe w pełni zgodne z danymi doświadczalnymi dla stali austenitycznej (rys. 2). Fakt ten przekonująco wskazał na konieczność uwzględniania różnych mechanizmów zachowania się dyslokacji w rzeczywistych warunkach. AKUŁOW [12], wykorzystując równanie podobne do (1.14), uzyskał dobrą zgodność obliczeń z doświadczeniem dla miedzi. Uwzględnienie natomiast zmniejszania się prędkości dyslokacji we wzorze (1.2) wskutek wzrostu ich gęstości umożliwiło WEBSTEROWI [13] uzyskanie wzoru dokładnie opisującego pełzanie dyslokacyjne tak nawet różnych materiałów, jak superstop niklowy oraz Al_2O_3 i to w sposób w pełni zgodny z wynikami doświadczalnymi.

Dobra zgodność z doświadczeniem wyników obliczeń teoretycznych, uwzględniających jednocześnie przebiegające różnorodnie przemiany dyslokacyjne w warunkach pełzania, wskazuje na celowość zastosowania podobnych metod w przypadku zmęczenia. Uwzględnienie możliwie wszystkich procesów, w których uczestniczą defekty sieci krystalicznej pod wpływem zmiennych obciążeń mogłoby zapewne rokować uzyskanie równie obiecujących wyników [46].

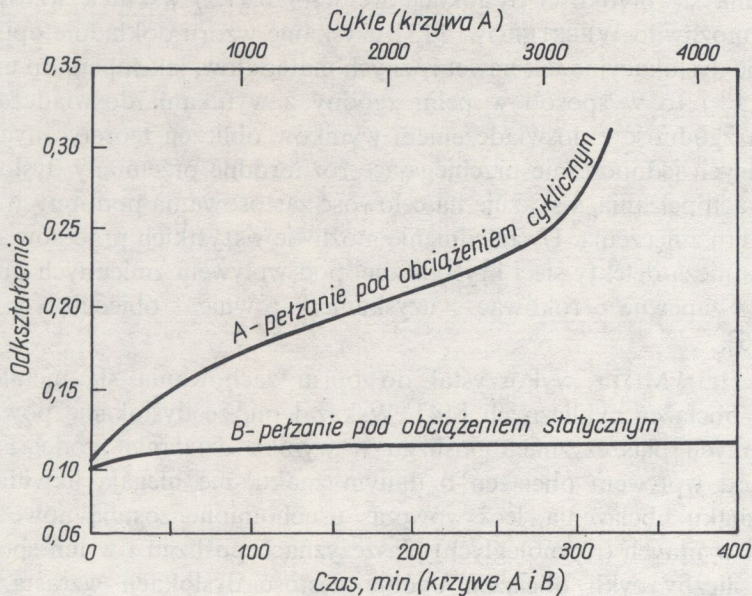
Wzór (1.3) MOTT wykorzystał do opisu zachowania się metalu pod wpływem obciążeń cyklicznych [14]. Wskazał on, że dyslokacje powstające w określonych płaszczyznach poślizgu w wyniku działania źródeł Franka-Reada pod wpływem obciążeń o danym znaku, nie ulegają likwidacji po zmianie znaku obciążenia, lecz wówczas uruchomione zostają nowe źródła dyslokacji w innych (równoległych) płaszczyznach poślizgu i w ten sposób ze wzrostem liczby cykli obciążeń ogólna gęstość dyslokacji wzrasta, a ich ruchliwość zmniejsza się. Prowadzi to do umocnienia, a pole histerezy w układzie σ ; γ_p zmniejsza się.

Podczas odkształceń cyklicznych następuje zmniejszenie się liczby dyslokacji ruchomych i tym samym powstają nowe przeszkody utrudniające poślizg dyslokacji. Dla podtrzymywania procesu odkształcenia konieczne więc jest zwiększanie obciążeń zewnętrznych. Muszą wtedy działać następujące mechanizmy [15]:

1) Powstawanie nowych dyslokacji ruchomych wskutek uruchomienia dyslokacji istniejących w dipolach lub /oraz wyginania się pętli dyslokacyjnych aż do przekroczenia krytycznego promienia Franka-Reada.

2) Pokonywanie przeszkód przez dyslokacje. Mogą to być dyslokacje poruszające się w tych samych lub różnych płaszczyznach poślizgu, uruchamiane przy wyższych naprężeniach.

Prędkość odkształcenia plastycznego $\dot{\gamma}_p$ zależy od częstotliwości obciążeń. W ramach jednego cyklu $\dot{\gamma}_p$ dwukrotnie zmienia się między wartością minimalną a maksymalną i zależnie od rodzaju cyklu może również zmieniać znak. Zmieniają się więc również następujące elementy: kierunek (zwrot) przemieszczeń dyslokacji, prędkość oraz gęstość dyslokacji ruchomych, a tym samym kierunek (zwrot) i natężenia strumienia dyslokacji. Ponieważ jednak po zmianie znaku naprężenia niekoniecznie te same dyslokacje poruszają się w kierunku przeciwnym, lecz mogą powstawać nowe dyslokacje ruchome w innych płaszczyznach poślizgu, całkowity więc efekt ich ruchów jest sumą



Rys. 3. Odkształcenie całkowite podczas pełzania statycznego i cyklicznego [22]

bezwzględnych wartości strumieni, kształtowanych zarówno przez przemieszczenia już istniejących, jak i nowo powstających dyslokacji ruchomych.

Występuje tu istotna różnica między przypadkiem działania obciążeń statycznych i cyklicznych (widoczna np. na rys. 3), uzyskanym w warunkach, kiedy cykliczne naprężenie rozciągające zmieniało się od zera do σ_{\max} , a statyczne naprężenie rozciągające miało tę samą wartość co cykliczne σ_{\max} . W przypadku obciążeń zmiennych odkształcenia plastyczne powstałe podczas kolejnych ćwiartek cykli obciążeń sumują się i skumulowane plastyczne odkształcenie styczne po N cyklach wynosi

$$(1.15) \quad \gamma_c = 4 \sum_1^N |\gamma_p| = 4 \sum_1^N |\varrho b x|,$$

gdzie γ_p oznacza połowę szerokości pętli histerezy na wysokości odpowiadającej zerowemu naprężeniu [15].

W ostatecznym wyniku całkowite odkształcenie plastyczne γ_c zostaje więc wytworzone przez sumę przemieszczeń wszystkich dyslokacji, które kiedykolwiek poruszały się od początku działania zmiennych obciążeń. Do oceny γ_c potrzebna jest znajomość zarówno średnich przemieszczeń x , jak i historii zmian gęstości dyslokacji, tzn. zmian stosunku gęstości dyslokacji ruchomych do gęstości całkowitej (współczynnika m we wzorze (1.5)).

Ponieważ po każdej zmianie znaku naprężeń część poprzednio ruchomych dyslokacji nadal pozostanie ruchoma, przeto przemieszczając się w poprzednich płaszczyznach poślizgu w kierunkach zmienionych na przeciwnie, inne dyslokacje pozostają nieruchome, jeszcze inne poprzednio nieruchome stają się ruchome, a jeszcze inne dopiero powstają w tych samych lub innych płaszczyznach poślizgu. Sytuacja ta powtarza się dwukrotnie, chociaż nie identycznie, w każdym kolejnym cyklu obciążeń; tak więc wypadkowy jej efekt można wyrazić strumieniem wypadkowym J_c , kształtowanym prędkością dryfu i zmianą gęstości dyslokacji ruchomych.

Wykorzystując wzory (1.15), (1.4) i (1.5) otrzymujemy

$$(1.16) \quad \dot{\gamma}_c = |b J_c| = 4b \sum_1^N |(m \varrho_t \dot{x} + m \dot{\varrho}_t x + \dot{m} \varrho_t x)|.$$

Podobnie jak dryf atmosfer Cottrella włączonych przez dyslokacje podczas pełzania dyslokacyjnego, tak samo dryf dyslokacji podczas zmęczenia kontroluje przyrost odkształcenia plastycznego i odpowiednio do liczby przyłożonych cykli obciążeń tworzy odkształcenie całkowite. Na efekty ilościowe podstawowy wpływ ma prędkość dryfu dyslokacji i jego zasięg oraz gęstość dyslokacji ruchomych i jej zmiany podczas całego procesu.

2. PRĘDKOŚĆ DRYFU DYSLOKACJI POD WPLYWEM ZMIENNYCH OBCIĄŻEŃ

Prędkość v poślizgu dyslokacji o jednostkowej długości wywołana działaniem obciążenia zewnętrznego wyraża się wzorem Einsteina [16, wzór (15.48)]:

$$(2.1) \quad v = BF = B\sigma b = Bb(\sigma_z - \tau),$$

gdzie B oznacza ruchliwość dyslokacji, pozostałe zaś oznaczenia są takie same jak we wzorze (1.6). Siła napędowa, podobnie jak naprężenie efektywne, może być wywołana przez obciążenie zewnętrzne, jak też np. przez przyciągające oddziaływanie swobodnej powierzchni metalu. Ogólnie jest ona geometryczną sumą wszystkich naprężeń działających na dany odcinek dyslokacji o jednostkowej długości. Jeżeli $\sigma_z > \tau$ na całej długości dyslokacji, to następuje jej ruch o dużym zasięgu; jeżeli zaś poszczególne przeszkody dyskretne powodują, że wprawdzie ogólnie $\sigma_z > \tau$, ale lokalnie $\sigma_z \leq \tau$, to lokalnie dyslokacja jest unieruchomiana i dalszy jej ruch może nastąpić dzięki dodatkowemu wkładowi siły naciągu liniowego, wzrastającemu wskutek zwiększenia kąta opasania przeszkody lub/oraz dzięki aktywacji termicznej.

Przy prędkościach dyslokacji $v \leq 0,5c$, gdzie c oznacza prędkość dźwięku, wartość $B = \text{const}$. A zatem v jest liniową funkcją F . Przy zmiennym obciążeniu prędkość v zmienia się więc proporcjonalnie do σ , a zatem przy zmianie znaku obciążenia zwrot prędkości zmienia się na przeciwny.

Również szeroko rozpowszechnionym w literaturze pojęciem jest odwrotność ruchliwości

$$(2.2) \quad B' = 1/B,$$

tnz. opór poślizgu (lepkości lub tarcia) dyslokacji, a zazwyczaj oznaczany również przez B . Występuje on zwłaszcza w równaniu KOHLERA [17], opisującym drgania dyslokacji na podobieństwo struny:

$$(2.3) \quad M \frac{d^2 x}{dt^2} + B' \frac{dx}{dt} - T \frac{d^2 x}{dy^2} = \sigma b,$$

gdzie M oznacza masę jednostki długości dyslokacji, B' — opór lepkości (tarcia), T — napięcie liniowe dyslokacji oraz x — przemieszczenie. Jest on również ogólnie używany w teorii tarcia wewnętrznego (Granato i Lücke) i licznych pracach późniejszych, np. [4]. Znana też jest wartość oporu poślizgu (tarcia) w różnych materiałach, oceniana na 10^{-5} do 10^{-4} N s/m² (10^{-4} do 10^{-3} dyn s/cm²) [18 i 4]. W pracy HIRTHA i LOTHEGO [16] posługujących się oznaczeniem B dla ruchliwości dyslokacji, w omówieniu równania Köhlera zastosowany jest na oznaczenie oporu poślizgu współczynnik $1/B$ [16, wzór (15.49)].

Wykorzystując pojęcia ruchliwości dyslokacji i współczynnika B , mające jednoznacznie zdefiniowane znaczenie fizyczne i znane wartości liczbowe, oraz stosując wzór Einsteina (por. rozdział 4)

$$(2.4) \quad B = D/kT,$$

gdzie k oznacza stałą Boltzmanna, T zaś temperaturę bezwzględną, dojdziemy do pojęcia „współczynnika dyfuzji dyslokacji” D . Ponieważ ruchliwość dyslokacji związana jest ze zdolnością dyslokacji do przemieszczeń jedynie pod wpływem obciążeń zewnętrznych, przeto pochodne pojęcie „dyfuzji dyslokacji”, charakteryzujące uśrednione efekty ich przemieszczeń w przestrzeni dwuwymiarowej (a przy uwzględnieniu możliwości poślizgów poprzecznych — również w przestrzeni trójwymiarowej), z natury rzeczy dotyczyć może opisu ruchu dyslokacji jedynie pod wpływem obciążeń, a zwłaszcza obciążeń zmiennych w czasie. Zmienne obciążenia, stanowiące równoważnik zmiennego gradientu potencjału chemicznego (por. rozdział 4), prowadzą do dryfu dyslokacji, podobnie jak gradient stężenia wywołuje dryf atomów i powstawanie ich strumienia.

W omówionym sensie pojęciem ruchliwości dyslokacji lub ich dyfuzji pod zmiennymi naprężeniami można posługiwać się w sposób wymienny. Zagadnienie to dokładniej omówione jest w punkcie 4. Świadczą o tym również następujące rozważania.

Pojęciem dryfu i dyfuzji przegięć w opisie ruchu dyslokacji posługiwał się DONTN [16 i 19]. Uważał on, że termicznie aktywowana dyfuzja przegięć wywołuje ruch dyslokacji, zwany dyfuzyjnym poślizgiem. Ponieważ termicznie aktywowany proces nie jest ukierunkowany, przeto pod jego wpływem każdy możliwy kierunek przemieszczeń jest równie prawdopodobny. Współczynnik dyfuzji przegięć (kolanek) D_k określony jest więc wzorem

$$(2.5) \quad D_k = b^2 v \exp(-Q_k/kT),$$

gdzie $v = 10^{12}$ do 10^{13} Hz oznacza częstotliwość drgań atomów, Q_k zaś — energię aktywacji ruchu przegięć (wysokość barier Peierlsa).

Możemy napisać podobny wzór na współczynnik dyfuzji dyslokacji [20]:

$$(2.6) \quad D = b^2 v_d \exp(-Q_d/kT),$$

gdzie v_d jest częstotliwością drgań segmentów pętli dyslokacji ($v_d = 10^6$ do 10^{11} Hz [26]), Q_d zaś oznacza energię aktywacji ruchu dyslokacji. Ruch taki, jako termicznie aktywowane drgania, nie jest ukierunkowany. Jeżeli jednak dyslokacja znajduje się w polu naprężeń, to częstotliwość jej przeskoków przez bariery Peierlsa staje się równa

$$(2.7) \quad v_d \exp\left(-\frac{Q_d \pm W_d}{kT}\right),$$

gdzie $W_d = \sigma H$ oznacza pracę wykonaną przez naprężenie efektywne (naprężenie wypadkowe z uwzględnieniem kierunków naprężeń składowych) oraz $H = blb'$ oznacza „objętość aktywacji”, gdzie b' jest amplitudą przemieszczeń odcinka dyslokacji podczas jego ruchu drgającego, l — długością odcinka (pętli) dyslokacji między silnymi punktami kotwiczenia.

Ponieważ częstość przeskoków dyslokacji (pokonywania barier) w kierunku zgodnym z kierunkiem naprężenia efektywnego jest większa niż w kierunku przeciwnym, to powstaje prędkość dryfu

$$(2.8) \quad v = bv_d \exp\left(-\frac{Q_d}{kT}\right) \sinh\left(-\frac{\sigma blb'}{kT}\right);$$

wzór ten przy spełnionej zazwyczaj nierówności $\sigma \ll kT/H$, z uwzględnieniem (2.6) i przy przyjęciu, iż $b' \approx b$, sprowadza się do wzoru

$$(2.9) \quad v = \frac{D}{kT} \sigma lb.$$

Warto zwrócić uwagę, że AKULOV [12 i 21] na zupełnie innej drodze (stosując statystyczny opis zachowania się zbiorów dyslokacji) uzyskał wzór na prędkość uśrednioną dyslokacji niemal identyczny z (2.8), mianowicie

$$(2.10) \quad v = v_0 \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right) \sinh \frac{A(\sigma - \sigma_k)}{kT},$$

gdzie $v_0 = \text{const}$, $A \approx \text{const}$, σ_k jest zaś naprężeniem progowym.

Podobny, chociaż dokładniej niesprecyzowany wzór znajdujemy w cytowanej już pracy [1]. Ashby i Frost stwierdzają, że przy przejściu od ruchu dyslokacji (ograniczonego przez dyfuzję) do ruchu poślizgowego (ograniczonego przez przeszkody) odpowiednie wyrażenia należy zastąpić

$$\dot{\gamma} \propto \sinh \alpha \sigma$$

lub

$$(2.11) \quad \dot{\gamma} \propto (\sinh \alpha \sigma)^m.$$

Jednakże do opisu tego procesu nie został jeszcze zaproponowany zadowalający model.

Funkcja \sinh występująca w powyższych wzorach świadczy o roli przemieszczeń dyslokacji w przemiennych kierunkach, a w warunkach działania zmiennych obciążeń przemieszczenia takie są o wiele bardziej stosowne, niż przy obciążeniach statycznych (przy pełzaniu).

W przypadku gdy dyslokacja ma długość jednostkową, przy uwzględnieniu (2.4), stwierdzimy równoważność wzorów (2.9) i (2.1). Istnieje jednak między nimi istotna różnica pojęciowa: wzór (2.1) wyraża prędkość poślizgu przy

stałym obciążeniu, podczas gdy (2.8) lub (2.9) — prędkość dryfu przy obciążeniu zmiennym.

Wzory (2.8) i (2.9) są analogiczne do (1.10) i (1.11) z tym zastrzeżeniem, że te pierwsze wyrażają prędkość dryfu dyslokacji wskutek ich poślizgów pod wpływem zmiennych obciążeń zewnętrznych przy $\sigma_z > \hat{\tau}$, podczas gdy drugie — prędkość dyslokacji kształtowaną przez dryf atmosfer Cottrella pod wpływem stałego obciążenia przy $\sigma_z < \hat{\tau}$, gdzie $\hat{\tau}$ jest maksymalnym oporem sieci.

Ponieważ jednak częstotliwość obciążeń zmiennych (laboratoryjnych i eksploatacyjnych ≈ 10 do 10^3) jest dużo mniejsza od częstotliwości drgań własnych odcinków dyslokacji ($> 10^6$), przeto w poszczególnych półcyklach obciążeń zmiennych sytuacja jest podobna do występującej przy obciążeniach statycznych przy $\sigma_z \geq \hat{\tau}$.

Prędkość dyslokacji kształtowana dryfem atomów [wzory (1.10), (1.11) i (1.13)] zależy od naprężenia statycznego, natomiast prędkość dryfu dyslokacji pod wpływem obciążeń zmiennych zależy od naprężenia średniego w cyklu.

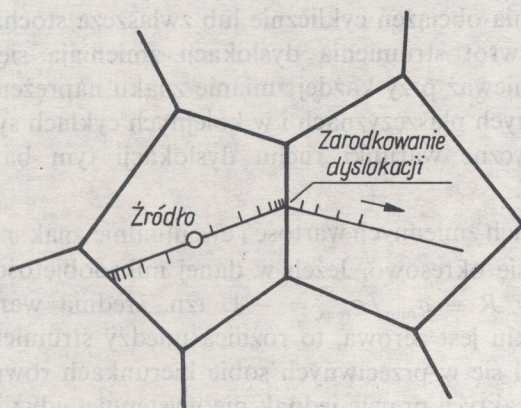
Podczas działania obciążeń cyklicznie lub zwłaszcza stochastycznie zmiennych, wartość i zwrot strumienia dyslokacji zmieniają się cyklicznie lub stochastycznie. Ponieważ przy każdej zmianie znaku naprężenia uruchomiane są dyslokacje w innych płaszczyznach i w kolejnych cyklach sytuacja nie bywa identyczna, to fizyczne warunki ruchu dyslokacji tym bardziej nabierają cech chaotycznych.

Przy naprężeniach zmiennych wartość i ewentualnie znak σ we wzorach (2.9) i (2.10) zmieniają się okresowo. Jeżeli w danej mikroobjętości metalu współczynnik amplitudy $R \equiv \sigma_{\min}/\sigma_{\max} = -1$, tzn. średnia wartość naprężenia efektywnego w cyklu jest zerowa, to różnica między strumieniami dyslokacji przemieszczającymi się w przeciwnych sobie kierunkach również jest zerowa. Sytuacja taka w praktyce prawie jednak nie występuje, gdyż nawet w kolejno następujących po sobie półcyklach warunki ruchu dyslokacji zmieniają się, chociażby wskutek zmiany gęstości dyslokacji i odmiennych możliwości ich ruchu przy np. obciążeniu ściskającym i rozciągającym. Tym bardziej więc przy niezerowej wartości średniego naprężenia efektywnego w cyklu powstaje strumień wypadkowy, zgodny z kierunkiem i zwrotem naprężenia średniego i prędkości dryfu. Powstanie tego strumienia jest najbardziej prawdopodobne w warstwie wierzchniej, gdzie (nawet jeżeli współczynnik $R = -1$, tzn. zewnętrzne naprężenie średnie jest zerowe) lokalny wypadkowy strumień dyslokacji jest niezerowy z powodu wpływu naprężeń zwierciadlanych wywołanych istnieniem powierzchni, a skierowanych zawsze prostopadle ku niej (patrz p. 3 i 5).

Strumień dyslokacji powstający wskutek ich dryfowania wywołanego obciążeniem zmiennym określony jest wzorem

$$(2.12) \quad J = qv = q B \sigma_{sr} b.$$

W polikryształach dryf dyslokacji pod wpływem zmiennych obciążeń występuje głównie wewnątrz ziarn, a jest utrudniony przez ich granice, chociaż nie w pełni. Wiadomo bowiem, że spiętrzenia dyslokacji docierające w swych płaszczyznach poślizgu do granic ziarn same tych granic nie przekraczają. Dodatkowe naprężenia towarzyszące tym spiętrzeniom oraz naprężenia spowodowane przez niejednakową odkształcalność różnie zorientowanych sąsiednich ziarn powodują jednak generowanie nowych dyslokacji po drugiej stronie granic (rys. 4) i poślizg ich do wnętrza ziarn sąsiednich. Zapewne liczba dyslokacji zatrzymanych po jednej stronie granicy nie jest równa liczbie dyslokacji uruchomionych po drugiej jej stronie, ale powinna tam ustalać się określona proporcja między tymi liczbami. A zatem w tym sensie, z uwzględnieniem istniejącego równocześnie procesu rozmnażania i zanikania dyslokacji, istnieje również „transport dyslokacji na zasadzie falowej”, tzn. że fizycznie zatrzymujące się jedne dyslokacje wywołują tworzenie się i dalsze przemiesz-



Rys. 4. Generowanie nowych dyslokacji w ziarnach sąsiednich przez spiętrzenie przed granicą ziarna

czanie się innych dyslokacji. Występuje tu pewien współczynnik przenoszenia, mniejszy lub większy od jedności. Odmienna sytuacja występuje w ziarnach wychodzących na zewnętrzną powierzchnię polikryształu. Pod tym względem obszarem szczególnie istotnym jest warstwa stanowiąca przypowierzchniową część ziarn wychodzących na powierzchnię zewnętrzną, gdzie dyslokacje na swej drodze nie napotykały silnych przeszkód w postaci granic ziarn.

3. WPLYW POWIERZCHNI NA SIŁĘ NAPĘDOWĄ DYSLOKACJI

Siła F przyciągania przez swobodną powierzchnię dyslokacji śrubowej o długości L wynosi [16, wzór (3.17)]

$$(3.1) \quad \frac{F}{L} = \frac{Gb^2}{4\pi l},$$

dyslokacji zaś krawędziowej [16 wzór (3.72)]

$$(3.2) \quad \frac{F}{L} = \frac{Gb^2}{4\pi l(1-\nu)},$$

gdzie l oznacza odległość dyslokacji od powierzchni, ν zaś współczynnik Poissona. Istnienie tych sił jest wprawdzie w teorii dyslokacji powszechnie znane, ale dotychczas nie są one uwzględniane w zagadnieniach praktycznych związanych z rozwojem pęknięć. Ze wzorów (3.1) i (3.2) wynika, że w odległości mniejszej niż $1 \mu\text{m}$ od powierzchni swobodnej metalu wartość sił przyciągania dyslokacji przez powierzchnię jest zbliżona do wartości sił pochodzących od cyklicznych obciążeń zewnętrznych, a ze zmniejszeniem się odległości l siły przyciągania coraz bardziej wzrastają. Wprawdzie w zagadnieniach wytrzymałościowych w budowie maszyn wymiary poniżej $1 \mu\text{m}$ nie budzą zainteresowania, jednak można wykazać, że w problematyce rozwoju pęknięć mogą one mieć kapitalne znaczenie [47].

Działanie na dyslokacje dodatkowego naprężenia przyciągającego je ku powierzchni wpływa na modyfikację kierunku i wartości naprężeń efektywnych w warstwie wierzchniej. Naprężenie zewnętrzne w warstwie wierzchniej składa się bowiem z naprężenia wywołanego obciążeniem zewnętrznym i naprężenia wywołanego przyciąganiem przez powierzchnię. Na przykład przy obciążeniu rozciągającym naprężenia styczne, działające pod kątem 45° względem powierzchni, sumują się z dodatkowym naprężeniem zorientowanym prostopadle do powierzchni i wzrastającym ze zmniejszającą się odległością od niej. Wpływa to na stosunkowo znaczny wzrost i zmianę kierunku naprężenia wypadkowego. Ze względu na małą skuteczność przeszkód w warstwie wierzchniej (brak granic ziarn) naprężenia oporu we wzorze (1.6) nie są zbyt wielkie. Poszczególne ziarna wychodzące na powierzchnię swobodną mają różnorodnie zorientowaną sieć krystaliczną i płaszczyzny łatwych poślizgów. W tych ziarnach, w których płaszczyzny łatwych poślizgów zorientowane są pod kątem zbliżonym do kąta orientacji wypadkowych naprężeń zewnętrznych, powstają najdogodniejsze warunki do poślizgu dyslokacji i wychodzenia ich na powierzchnię.

4. POSTACIE RÓWNIANIA STRUMIENIA

Wiadomo, że najbardziej powszechnym czynnikiem wywołującym ukierunkowane przemieszczenia (strumień dyfuzyjny) jest gradient potencjału chemicz-

nego $d\mu/dx$. Potencjał chemiczny i -tego składnika określony jest wzorem [27, str. 122] i [28]

$$(4.1) \quad \mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{p, T, n_k}, \quad i \neq k,$$

gdzie G jest swobodną energią (entalpią) Gibbsa układu złożonego z k składników, n_i zaś liczbą elementów i -tego składnika w układzie. Potencjał chemiczny wakansów lub dyslokacji jest więc równy swobodnej energii Gibbsa przypadającej na jeden wakans lub dyslokację. Jeżeli ilość dyslokacji wyrażona jest ich gęstością, to potencjał chemiczny dyslokacji odnosi się do dyslokacji o długości jednostkowej.

Potencjał chemiczny i -tego składnika, równoznaczny ze swobodną entalpią (energiją) aktywacji, zależy od jego aktywności a_i , gdyż

$$(4.2) \quad \mu_i = \mu_i^0 + kT \ln a_i,$$

gdzie μ_i jest podstawowym potencjałem chemicznym, tzn. swobodną entalpią (energiją) czystego składnika, $a_i = f_i c_i$ — aktywnością składnika, gdzie f_i oznacza współczynnik aktywności, mający w stopach (roztworach) rozrzedzonych wartość stałą, c_i — stężeniem.

W celu obliczenia μ_i w układzie izotermicznym przy stałym ciśnieniu, musimy wyznaczyć zmianę energii swobodnej między rozważanymi punktami, wywołaną dodaniem do układu lub usunięciem z niego atomu. W cieczech jest to zadanie proste, gdyż w różnych punktach zmianę tę określają dane chemiczne otoczenia (liczba i rodzaj atomów), a naprężenia inne niż hydrostatyczne nie występują.

W ciele stałym, ze względu na rolę sieci krystalicznej, zagadnienie nie jest tak proste. Na przykład atom może być dodany w danym punkcie w międzywęźlu lub w miejsce wakansu, a każdy z tych sposobów inaczej wpływa na wartość potencjału chemicznego μ_i . A zatem siła napędowa dyfuzji byłaby różnie oceniona w obu tych przypadkach. W ciele stałym potrzebna jest więc ocena potencjału chemicznego, niezależna od sposobu wprowadzenia do układu lub usunięcia z niego dodatkowych atomów, a tym samym — niezależna od mechanizmu dyfuzji.

W odróżnieniu od liczby atomów w danym układzie, liczba defektów może ulegać znacznym zmianom, nieraz dość szybkim. Stan równowagi całego układu ustala się, gdy przy niezmienniej całkowitej liczbie atomów w układzie jego energia G osiąga minimum; potencjał μ_i jest wówczas taki sam we wszystkich punktach układu.

Posługując się wzorem (4.1) możemy wyznaczyć tzw. mikroskopowe potencjały chemiczne [28] poszczególnych składników układu: atomów zajmujących pozycje węzłowe, atomów międzywęzłowych, wakansów, biwakan-

sów, dyslokacji itp., jeżeli za n_i podstawimy liczby tych składników występujących w jednostce objętości kryształu.

Można też obliczyć tzw. makroskopowy potencjał chemiczny [28]

$$(4.1) \quad \mu_a = \left(\frac{\partial G}{\partial n_a} \right)_{p, T},$$

przyjmując za G swobodną energię Gibbsa całego układu i za n_a całkowitą liczbę atomów w układzie. Zmiana swobodnej energii Gibbsa wynikająca z dodania dodatkowego atomu jest tu niezależna od tego, czy atom ten znajdzie się w sieci krystalicznej na powierzchni ciała, czy też w miejscu wakansu lub w położeniu międzywęzłowym we wnętrzu kryształu — pod warunkiem, że kryształ jest w równowadze. Potencjał makroskopowy ma więc charakter fenomenologiczny i nie wiąże się z rzeczywistą mikroskopową strukturą ciała stałego.

W przypadku kiedy na ciało stałe działa naprężenie zewnętrzne, potencjał chemiczny ulega modyfikacji [28 i 29]

$$(4.3) \quad \mu_i = \left(\frac{\partial F}{\partial n_i} \right)_{\sigma, T, n_k} \pm W,$$

gdzie F oznacza swobodną energię Helmholtza, $W = \sigma V_A$ pracę przypadającą na element składnika, σ naprężenie oraz V_A objętość aktywacji.

STEVENS i DUTTON [30 i 31], analizując rozwój pęknięcia wskutek dyfuzji wakansów, uwzględnili wpływ obciążeń zewnętrznych na potencjał chemiczny przez dodanie do niego wyrazu μ'_a

$$(4.4) \quad \mu'_a = \frac{\Omega_A}{r} \left[\frac{\pi(1 - \nu^2)}{E} \sigma_z^2 c - \gamma \right],$$

gdzie Ω_A oznacza objętość atomu, r promień wierzchołka pęknięcia, σ_n naprężenie zewnętrzne, $2c$ długość pęknięcia, γ energię powierzchniową, ν współczynnik Poissona oraz E moduł Younga.

W tym ujęciu potencjał chemiczny atomów zajmujących pozycje węzłowe określono wzorem zmodyfikowanym w porównaniu z (4.2)

$$(4.5) \quad \mu_i = \Delta G_A + \mu'_a + k \ln C_A,$$

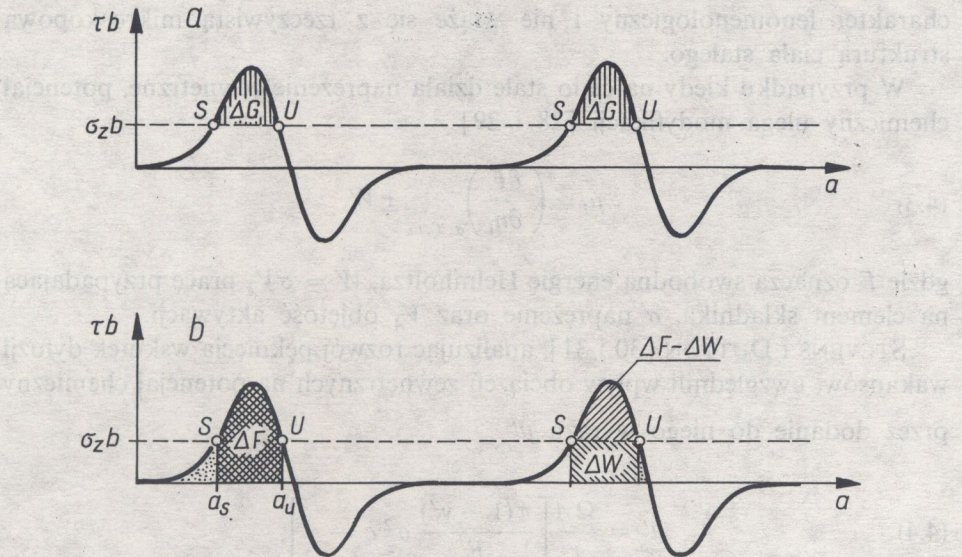
gdzie ΔG_A oznacza zmianę swobodnej energii Gibbsa wywołaną dodaniem atomu w pozycji węzłowej przy braku naprężeń zewnętrznych oraz $C_A = n_A / (n_A + n_v)$, gdzie n_A i n_v oznaczają liczbę atomów w pozycjach węzłowych i liczbę wakansów.

W innych publikacjach (np. [28]), we wzorach typu (4.5) zamiast μ'_a wprowadza się wyrazy $-\sigma_n \Omega_A + p \Delta V_v$, gdzie σ_n oznacza normalne naprężenie rozciągające, Ω_A objętość atomu (czyli objętość aktywacji), p ciśnienie hydrostatyczne oraz ΔV_v objętość relaksacji wakansu.

Potencjał chemiczny dyslokacji zawartych w układzie złożonym z k składników może być określony — zależnie od okoliczności — wzorem (4.1), (4.1') lub (4.3). Swobodna energia Gibbsa w tych wzorach jest sumą

$$(4.6) \quad G = \sum \mu_i \mu_i,$$

przy czym jako i -te składniki mogą występować atomy w położeniach węzłowych, atomy międzywęzłowe, wakanse, biwakanse oraz dyslokacje.



Rys. 5. Zmiana oporu ruchu poślizgowego τb dyslokacji jako funkcja pola przebytej przez nią powierzchni [4]

Wyznaczony w ten sposób potencjał odzwierciedla swobodną energię przypadającą na dyslokację (jeśli n_i jest liczbą dyslokacji w układzie) lub na jednostkę długości dyslokacji (jeśli n_i jest gęstością, tzn. odnosi się do jednostki objętości układu).

Swobodna energia Gibbsa ma podstawowe znaczenie w analizie ruchu dyslokacji. Kiedy naprężenie zewnętrzne σ_z jest mniejsze od oporu ruchu τ (rys. 5), a przy stałym naprężeniu i temperaturze zostanie ono uzupełnione przez aktywację cieplną, to podobnie jak we wszystkich innych procesach dyfuzji — obiekt dyfuzji (w tym przypadku dyslokacja) uzyska możliwość przemieszczenia się. Z rys. 5 wynika, że potencjał chemiczny (swobodna energia Gibbsa) przypadający na dyslokację wynosi

$$(4.7) \quad \mu_d = \Delta G \equiv \Delta F - \Delta W = \Delta F - \sigma_z l b x,$$

gdzie F oznacza swobodną energię Helmholtza, W pracę wykonaną przez naprężenie zewnętrzne σ_z , l długość dyslokacji oraz x przemieszczenie dyslokacji.

W oznaczeniach stosowanych w termodynamice wzór (4.7) — przy stałym ciśnieniu i temperaturze — ma postać

$$(4.8) \quad \mu_d = \Delta G = \Delta F \pm p \Delta V,$$

gdzie p oznacza ciśnienie, V zaś objętość.

Jeżeli więc jednocześnie działają różne siły lub ciśnienia, to wszystkie one mogą być zawarte w wyrazie ΔW lub $p \Delta V$. Z rys. 5 widać, że jeżeli jednostkowa siła napędowa dyslokacji $(\sigma_z - \tau)b$ jest dodatnia, to pole zawarte między wykresem oporu poślizgu a siłą zewnętrzną $\sigma_z b$ (linią poziomą) odzwierciedla energię rozproszoną podczas ruchu dyslokacji. Jeśli zaś siła napędowa jest ujemna, to pole między tymi liniami odzwierciedla energię, która ma być dostarczona dyslokacji dzięki aktywacji cieplnej, aby dyslokacja mogła poruszyć się przy stałym naprężeniu zewnętrznym σ_z . Energia pobrana ze zbiornika cieplnego podczas aktywacji cieplnej nie może w uśrednionym bilansie być większa od energii wprowadzonej do tego zbiornika wskutek rozpraszania energii podczas ruchu dyslokacji pod wpływem dodatniej siły napędowej.

Z rys. 5 i powyższych rozważań wynika, że ze wzrostem naprężeń zewnętrznych σ_z wartość swobodnej energii Gibbsa i potencjału chemicznego potrzebnego do uruchomienia dyslokacji zmniejsza się.

Jeżeli bowiem $\sigma_z \geq \tau$, to $\Delta G = 0$ i z (4.7) mamy

$$(4.9) \quad \mu_d = \Delta F = \Delta W = \sigma_z b l x;$$

dla dyslokacji zaś o długości jednostkowej

$$(4.9') \quad \mu_d = \Delta F = \Delta W = \sigma_z b x,$$

oraz

$$(4.10) \quad \text{grad } \mu_d = \sigma_z b.$$

Oznacza to, że efekty wywołane przez potencjał chemiczny nie są wtedy istotne, gdyż ruchy dyslokacji kształtowane są przez samo tylko oddziaływanie naprężeń zewnętrznych. Rolę gradientu potencjału chemicznego, jako siły napędowej dyfuzji, przejmuje wówczas obciążenie zewnętrzne.

W literaturze potencjał chemiczny i pracę mechaniczną (gradient potencjału i siłę) traktuje się wymiennie, zarówno w odniesieniu do obiektów punktowych (atomów, wakansów), jak i dyslokacji [32, 33 i 34].

Gradient potencjału chemicznego grad μ_i , czyli gradient swobodnej energii Gibbsa, stanowi siłę napędową, pod wpływem której powstaje strumień i -tego składnika. Posługując się makroskopowym potencjałem wg (4.1'), uzyskujemy wzór na strumień w postaci zaproponowanej przez ONSAGERA [35]:

$$(4.11) \quad J_i = M_i \frac{\partial \mu_i}{\partial x},$$

gdzie $M_i = -B_i c_i$ oznacza ruchliwość i -tego składnika wg Onsagera, c_i stężenie, B_i zaś ruchliwość wg Einsteina, omawianą w punkcie 2 (wzór (2.4)).

Z teorii dyfuzji wiadomo [27, s. 141], że

$$(4.12) \quad \frac{\partial \mu_i}{\partial x} = \frac{kT}{c_i} \frac{\partial c_i}{\partial x}.$$

Podstawiając (4.12) do (4.11) i uwzględniając (2.4) otrzymujemy

$$(4.13) \quad J_i = c_i v = M_i \frac{\partial \mu_i}{\partial x} = -B_i c_i \frac{\partial \mu_i}{\partial x} = -B_i kT \frac{\partial c_i}{\partial x} = -D_i \frac{\partial c_i}{\partial x}.$$

Wykorzystując te podstawowe wzory odnoszące się do opisu procesów dyfuzyjnych [27, s. 124] i porównując je z uzyskanym na innej drodze wzorem (2.9), mamy w odniesieniu do dyslokacji

$$(4.14) \quad J_d = B_Q \sigma b = -B_Q \frac{\partial \mu_d}{\partial x} = -D_d \frac{\partial Q}{\partial x}.$$

Wykorzystując pierwsze dwa wyrażenia prawej strony (4.14) mamy potwierdzenie wzoru (4.10), tzn.

$$(4.10) \quad \text{grad } \mu_d \equiv \sigma_z b.$$

Z kolei pierwsze i trzecie wyrażenie wykazują równoważność wpływu (zmiennych) naprężeń i gradientu stężenia lub gęstości.

Skutek działania zmiennych naprężeń efektywnych jest więc równoważny ze skutkiem działania gradientu potencjału chemicznego, a także równoważny ze skutkiem działania gradientu stężenia (gęstości). Działanie naprężeń zmiennych w czasie jest równoważne z działaniem gradientu potencjału o zmiennej wartości i ewentualnie zmiennym znaku; wypadkowy strumień wyrażony wzorem (2.12) jest wtedy zależny od wartości i zwrotu prędkości dryfu. P. G. SHEWMON stwierdza w [27, s. 124]: „Gradient stężenia, zastępujący gradient potencjału chemicznego, nie wywołuje pojawiania się siły w takim sensie, w jakim wywołuje ją gradient potencjału, ale wytwarza wypadkowy strumień atomów i w związku z tym może być traktowany jako siła”. Stwierdzenie to potwierdza więc równoważność różnych form zapisu równania (4.13) i (4.14)

i może też być odwrotnie: jeżeli proces dyfuzji przebiega pod wpływem siły (gradientu potencjału, naprężenia zewnętrznego itp.), to do jego opisu można użyć teorii gradientu stężenia. Równoważność ta ma szeroki aspekt praktyczny, znajdujący odzwierciedlenie w punkcie 5.

Dla układów nieznacznie odbiegających od stanu równowagi często używa się równań dyfuzji w postaci Onsagera (4.11); siłę napędową dyfuzji stanowi w nich $\text{grad } \mu$. W większości procesów dyfuzyjnych warunki brzegowe są jednak znane w odniesieniu do stężenia dyfundujących obiektów, a nie do ich potencjału chemicznego, co zmusza do opisu tych procesów raczej za pomocą równań Ficka. W wyniku tego została nagromadzona bogata literatura dotycząca rozwiązywania zagadnień opisywanych równaniami Ficka. Istnieją jednak również procesy dyfuzyjne, w których warunki brzegowe znane są w teorii potencjału chemicznego. Należą do nich zwłaszcza procesy, w których strumień dyfuzyjny wywołuje zmiany kształtu ciała, jak np. pełzanie dyfuzyjne, wspinanie dyslokacji, poślizg po granicach ziarn, spiekanie, wzrost porów i pękanie. W tych przypadkach korzystanie z równań dyfuzji w postaci Onsagera jest o wiele dogodniejsze. Poza tym równania te mogą służyć do skoncentrowania bezpośredniej uwagi na termodynamicznych przyczynach przepływu materii [28].

W praktyce równania Onsagera zazwyczaj nie bywają jednak bezpośrednio przydatne do analiz ilościowych, gdyż zawierają ruchliwości Onsagera, a nie występujące w równaniach Ficka współczynniki dyfuzji, których doświadczalne wyznaczenie jest łatwiejsze. W wyniku tego na ogół chętnie zastępuje się ruchliwości przez odpowiednie współczynniki dyfuzji [28, 31 i 49]. Stosuje się przy tym następującą procedurę.

1. Układa się wzór na potencjał chemiczny kształtujący dyfuzję, będący — zgodnie z (4.5) — funkcją stężenia i ciśnienia lub obciążenia (w układzie izotermicznym). Wyznacza się gradient potencjału i formułuje równanie Onsagera.

2. Układa się równanie Ficka, zawierające gradient stężenia ustalony w p. 1. W równaniu tym występuje odpowiedni współczynnik dyfuzji, zdefiniowany samym równaniem.

3. Przyrównanie równań strumieni ustalonych wg p. 1 i 2 (z wykorzystaniem wzoru (4.13)) wykazuje występujący w danych warunkach związek (ilościowy) między ruchliwością a współczynnikiem dyfuzji, który może służyć do wyznaczenia współczynnika M_i w równaniach Onsagera lub współczynnika dyfuzji w równaniu Ficka.

Wobec równoważności różnych postaci równania dyfuzji (4.13) i (4.14) nie może być różnicy w wynikach obliczeń, niezależnie od tego, która wersja tego równania jest w tym celu wykorzystana.

Z teorii dyfuzji wiadomo, że wartości współczynników dyfuzji w rozredzonych lub idealnych roztworach stałych nie są takie same, jak w roz-

tworach o dużym stężeniu. Ważne jest, że w obu tych przypadkach współczynniki dyfuzji mogą różnić się między sobą nie tylko co do wartości bezwzględnej, ale i znaku.

W warunkach działania obciążeń cyklicznych stężenie dyslokacji (tzn. gęstość odniesiona do liczby węzłów sieci na jednostce powierzchni) jest duże (zwłaszcza w splotach dyslokacji), osiągając stan nasycenia, tzn. zbliżając się do maksymalnych wartości fizycznie możliwych. W związku z tym wydaje się, że w równaniach typu (2.4) i (4.14) wartości zarówno D jak i B powinny być wyznaczone metodą DARKENA [25], jak dla układów o dużym stężeniu składników.

Podczas gdy w roztworach stałych o małym stężeniu mają zastosowanie wzory (2.4) i (4.13), to przy dużym stężeniu [27, s. 125] mamy

$$(4.15) \quad D_i = B_i kT \left(1 + \frac{d \ln f_i}{d \ln c_i} \right)$$

lub

$$(4.15') \quad D_i = D_i^* \left(1 + \frac{d \ln f_i}{d \ln c_i} \right),$$

gdzie f_i oznacza współczynnik aktywności i -tego składnika oraz c_i stężenie. Wyrażenie w nawiasie we wzorach (4.15) jest mnożnikiem termodynamicznym. A zatem w przypadku, gdy w układzie występuje gradient potencjału chemicznego lub gradient stężenia składnika, ilościowe efekty procesów dyfuzyjnych są inne niż w układzie o rozkładzie jednorodnym składnika. Zależnie od energii wzajemnego oddziaływania poszczególnych składników układu, mnożnik termodynamiczny może być dodatni lub ujemny. Przejściowy stan określony jest równaniem spinodali

$$(4.16) \quad d \ln f_i / d \ln c_i = -1.$$

Ma on decydujący wpływ na kierunek i zwrot strumienia; jeżeli mnożnik termodynamiczny jest dodatni, to strumień przemieszcza się z obszarów o większym stężeniu ku obszarom o stężeniu mniejszym. Jeżeli natomiast mnożnik ten jest ujemny, to występuje odwrotna (*hill up*) dyfuzja, tzn. strumień podąża ku obszarom o większym stężeniu (lecz o mniejszym potencjale chemicznym, mniejszej swobodnej energii Gibbsa).

Mechanizm takiego działania jest w pełni poznany w przemianach fazowych i w tworzeniu się nowych faz, kiedy to z początkowo prawie jednorodnie rozłożonych składników powstają wydzielone obszary o wzrastającym stężeniu tego składnika jako funkcji czasu, którego mnożnik termodynamiczny jest ujemny. Zagadnienie to jest opracowane teoretycznie [27 i 53] i zweryfikowane doświadczalnie.

Jest pewna analogia między powyższymi procesami a procesem rozpadu spinodalnego niektórych stopów, jak np. Cu-Ni-Fe [45], Cu-Ni-Sn [48], Al-Zn [50]. Teoria tego rozpadu, opracowana przez J. W. CAHNA i współpracowników [36 do 38, 40 i 41], uwzględnia oddziaływanie na dyslokacje różnego rodzaju sił wewnętrznych powstających w stopach o niejednorodnym rozkładzie stężenia składników. Wartość tych sił wywołanych gradientem stężenia zmienia się odpowiednio do liczby dyslokacji, które przemieściły się w danej płaszczyźnie poślizgu. Stwarzanie przez siły gradientowe dodatkowego oporu ruchu dyslokacji przyczynia się do umocnienia stopu w miarę postępującego rozpadu spinodalnego [36 i 45].

Przeszkodami utrudniającymi ruch dyslokacji są zazwyczaj koherentne lub niekoherentne przeszkody dyskretne. Istnieją jednak również przeszkody ciągłe, stawiające opór ruchom dyslokacji wskutek występowania łagodnych (dalekiego zasięgu) fluktuacji stężenia, bez gwałtownych zmian składu [36]. Przeszkody te wynikają z niestabilności termodynamicznej zwanej spinodalem.

A zatem ze wzrostem obciążenia i odkształcenia, zróżnicowanie rozkładu dyslokacji wzrasta, tzn. występuje sytuacja analogiczna do powstającej w wyniku odwrotnej dyfuzji. Można stąd wnioskować, że w przypadku dyslokacji rozmnażających się pod wpływem obciążeń zewnętrznych (zwłaszcza cyklicznych) wartość

$$(4.17) \quad \frac{d \ln f_d}{d \ln \rho} < -1,$$

gdzie f_d oznacza współczynnik aktywności dyslokacji oraz ρ gęstość dyslokacji. Ponieważ ze wzrostem amplitudy efektywnych naprężeń cyklicznych tendencja do zróżnicowania rozkładu gęstości dyslokacji szybko wzrasta, to należy sądzić, że $d \ln f_d / d \ln \rho$ jest funkcją naprężenia i ewentualnie liczby cykli obciążeń.

Wykorzystując równanie (4.13), (4.14) oraz (4.15) i nierówność (4.17) otrzymujemy równanie opisujące strumień dyslokacji przy cyklicznych obciążeniach, a uwzględniając ogólnie znane wyniki doświadczeń, znajdujemy pełną analogię z omówioną sytuacją: ze wzrostem liczby cykli obciążeń gęstość dyslokacji wzrasta w sposób niejednorodny, tzn. w pewnych mikroobszarach (żyłach, granicach komórek dyslokacyjnych) gęstość (stężenie) dyslokacji osiąga wartość o 2 lub 3 rzędy większą niż w mikroobszarach sąsiednich. Zróżnicowanie to jest tym większe, im większa amplituda naprężeń, co wskazuje, że w odniesieniu do dyslokacji amplituda kształtuje wartość mnożnika termodynamicznego. Zagadnienie to będzie tematem osobnego opracowania.

Rozpad spinodalny opisywano za pomocą równania uwzględniającego wzory (1.12) i (4.15), tzn.

$$(4.18) \quad \frac{\partial c}{\partial t} = \left[c D_1^* + (1 - c) D_2^* \right] \left[1 - \frac{\partial \ln f_2}{\partial \ln c} \right] \nabla^2 c,$$

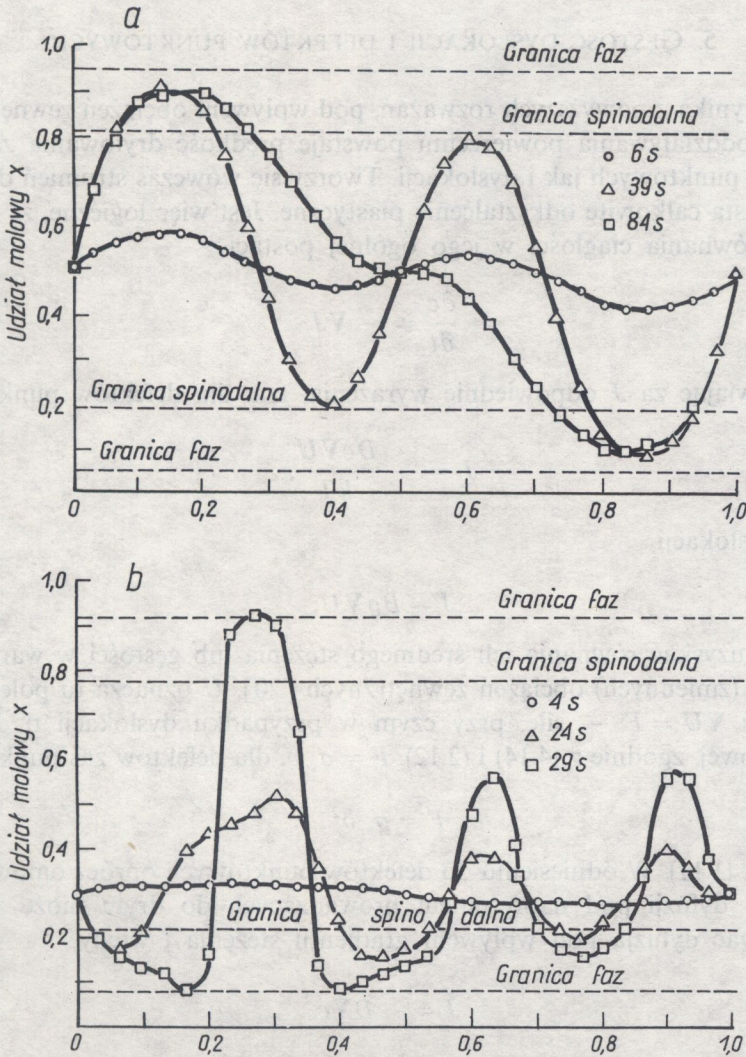
gdzie D_i^* jest współczynnikiem samodyfuzji składnika 1 lub 2. Wyniki pokrywały się z doświadczeniem np. w warunkach ciągłego ochładzania oraz przemian izotermicznych [40]. Rozpadowi towarzyszy, przynajmniej w początkowym etapie, wzrost sinusoidalnej fluktuacji stężenia, której amplituda jest funkcją czasu.

Szereg własności późniejszego etapu rozpadu spinodalnego oraz wczesnego etapu wzrostu (grubienia) cząstek daje się opisać przez wprowadzenie do równania typu (4.18) pochodnych swobodnej energii Gibbsa lub Helmholtza, jako odpowiedników potencjału chemicznego oraz dodatkowych wyrazów nieliniowych, zawierających trzecie, czwarte i ewentualnie wyższe pochodne stężenia [41 i 42]. Niektóre z nich (zwłaszcza trzecia pochodna) wywołują wzrost zróżnicowania stężenia w fazach, zwiężając jego zasięg przestrzenny [41]. Prowadzi to do ostrzejszych (gwałtowniejszych) przejść na granicach między sąsiednimi obszarami i zwiększa na zasadzie prawa dźwigni zróżnicowanie: wąskie obszary mają bardzo duży wzrost stężenia ponad wartość średnią, a szerokie obszary — małe obniżenie poniżej średniej. Inni autorzy uwzględniają również wkład energii odkształcenia do rozpadu spinodalnego, przy czym na tle metody jej uwzględniania dochodziło do kontrowersji [43].

Rozpad spinodalny może również prowadzić do tworzenia się defektów dwuwymiarowych, jak błędy ułożenia i granice bliźniakowania [44]. Badania utraty koherencji płytkowej struktury w spinodalnie rozpadających się stopach Cu-Ni-Fe wykazały [45], że przebudowa tej mikrostruktury następuje wskutek zatrzymywania poślizgowych dyslokacji i następnie ich rozmnażania się na granicach międzyfazowych. Wzrost gęstości dyslokacji poślizgowych i ich skręcanie się spiralnie wokół płytek przyspieszało utratę zgodności (koherencji) między nimi.

Rozpad spinodalny, przez wielu autorów badany doświadczalnie, był też analizowany przez jego symulację komputerową [39]. Możliwość przejścia jednej niestabilnej fazy w dwie fazy stabilne zweryfikowano przez analizę zachowania się rozwiązania typowego równania wyjściowego, zawierającego wyraz liniowy (jak w równaniu Ficka), wyraz nieliniowy (trzecią pochodną stężenia) oraz wyraz gradientowy (czwartą pochodną), wyrażający wpływ krzywizny i gradientu stężenia na swobodną energię.

Rozwiązanie tego równania dało wyniki zgodne z doświadczeniem, a poza tym modelowanie poszczególnych wielkości występujących w równaniu pozwoliło łatwo zorientować się w tendencjach rozwoju rozpadu. Na rys. 6a przedstawione są wyniki uzyskane przy zawartości składników $c_1 = c_2 = 0,5$, na rys. 6b — przy $c_1 = 0,3$. Z porównania obu rysunków wynika, że w drugim przypadku zróżnicowanie stężenia przebiega szybciej i maksymalna jego wartość jest większa, przy czym wzrost jest szczególnie szybki w końcowej fazie procesu.



Rys. 6. Wzrost zróżnicowania rozkładu stężenia jednego składnika w układzie dwuskładnikowym o początkowym uśrednionym udziale: $c_1 = 0,5$ (a) i $c_1 = 0,3$ (b) [39]

Jeśli by tendencję tę przenieść na zróżnicowanie rozkładu gęstości dyslokacji pod wpływem zmiennych obciążeń, to analogia między obu procesami w pełni się uwidoczni. O przydatności bardziej rozwiniętych postaci równania dyfuzji do opisu struktur dyslokacyjnych, jakie mogą powstawać w złożonych warunkach obciążeń, świadczą wyniki podane przez HAKENA w [51 i 52]. Numeryczne rozwiązania równania dyfuzji z dodatkowymi wyrazami nieliniowymi dało wyniki analogiczne do rozwiniętych przestrzennych struktur dyslokacyjnych [51, rys. 9.2 i 9.3], jak też i np. do struktur powstających w spinodalnie rozpadających się stopach (pełna analogia [51, rys. 9.1] z [45]).

5. GĘSTOŚĆ DYSLOKACJI I DEFECTÓW PUNKTOWYCH

Jak wynika z powyższych rozważań, pod wpływem obciążeń zewnętrznych oraz sił oddziaływania powierzchni powstaje prędkość dryfowania zarówno defektów punktowych jak i dyslokacji. Tworzy się wówczas strumień dyslokacji i wzrasta całkowite odkształcenie plastyczne. Jest więc logiczne, że korzystając z równania ciągłości w jego ogólnej postaci

$$(5.1) \quad \frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla J$$

i podstawiając za J odpowiednie wyrażenia, tzn. dla defektów punktowych

$$(5.2) \quad J = -\frac{Dc\nabla U}{kT},$$

a dla dyslokacji

$$(5.3) \quad J = B\varrho\nabla U,$$

możemy uzyskać równania ich średniego stężenia lub gęstości w warunkach działania (zmiennych) obciążeń zewnętrznych [20]. U oznacza tu pole potencjału, zaś $\nabla U = F$ — siłę, przy czym w przypadku dyslokacji o długości jednostkowej, zgodnie z (4.14) i (2.12), $F = \sigma_{sr}b$, dla defektów zaś punktowych

$$F = \sigma_{sr}b^2,$$

por. wzór (1.11). W odniesieniu do defektów punktowych oprócz omówionych procesów dyfuzji pod naprężeniem prowadzących do dryfu może również występować dyfuzja pod wpływem gradientu stężenia i wtedy

$$(5.4) \quad J = -D\nabla c.$$

Zastępując czas t przez liczbę przyłożonych cykli obciążeń N , otrzymujemy równanie o ogólnej postaci

$$(5.5) \quad \frac{\partial c}{\partial N} = D\nabla\left(\nabla c + \frac{c\nabla U}{kT}\right).$$

Oprócz tego konieczne jest uwzględnianie faktu, że zmiany $\partial c/\partial N$ lub $\partial\varrho/\partial N$ następują jedynie podczas i wskutek ruchu dyslokacji. Proces jest dość złożony: w danej mikroobjętości występują ruchy dyslokacji w cyklicznie zmieniających się kierunkach (zwrotach), a jednocześnie wskutek tych ruchów powstaje szereg różnorodnych czynników powodujących wzrost i zmniejszanie się liczby tych dyslokacji, w wyniku tego — i defektów punktowych. Efekty tych złożonych przemian są mierzalne w postaci całkowitego odkształcenia

plastycznego (wzory typu (1.15) i (1.16)) i całkowitej gęstości dyslokacji. Mogą również być ważne zmiany tych wielkości w czasie, tzn. prędkość odkształcenia plastycznego i tempo wzrostu gęstości dyslokacji $\partial \varrho / \partial N$.

Te uśrednione efekty mogą być opisane z uwzględnieniem równań typu (1.14), odzwierciedlających procesy rozmnażania i zanikania dyslokacji pod wpływem obciążeń zewnętrznych. Otrzymujemy więc dla dyslokacji

$$(5.6) \quad \frac{\partial \varrho}{\partial N} = BkTV \left(\nabla \varrho + \frac{\varrho \nabla U}{kT} \right) + k_1 \varrho - k_2 \varrho^2.$$

Jest to równanie dyfuzji wywołanej wpływem naprężeń zewnętrznych (pochodzących od obciążeń zewnętrznych i oddziaływania powierzchni), z dodatkowym źródłem dodatnim i ujemnym. W tej postaci może ono być wykorzystane do oceny średniej gęstości i rozkładu dyslokacji, zarówno przy obciążeniach statycznych (pełzanie), jak i zmiennych (zmęczenie). Wartości współczynników w obu tych przypadkach są oczywiście różne i zależą też od własności danego materiału.

Ze względów przedstawionych przy omawianiu równoważności różnych form równań (4.13), wykorzystujemy tu postać równania dyfuzji dyslokacji Ficka mimo że fizycznie bardziej uzasadniona jest postać Onsagera. Czynimy tak ze względu na większą jednoznaczność sformułowania warunków granicznych. W ciele stałym w kształcie walca o promieniu zewnętrznym r_0 i promieniu bieżącym r , przenoszącym obciążenia zewnętrzne, warunek początkowy ma postać

$$(5.7) \quad \varrho(r, 0) = \varrho_0(r),$$

warunek zaś brzegowy

$$(5.8) \quad \varrho(r_0, N) = 0,$$

gdyż gęstość dyslokacji na powierzchni zewnętrznej zawsze jest zerowa. (Dyslokacja wychodząca na powierzchnię znika, wytwarzając na niej uskok).

Dla defektów punktowych, uwzględniając (5.2) i (5.4) oraz procesy rozmnażania i zanikania, mamy

$$(5.9) \quad \frac{\partial c}{\partial N} = D \nabla \left(\nabla c + \frac{c \nabla U}{kT} \right) + k_3 c - k_4 c.$$

Dla konkretnych odmian defektów punktowych równanie (5.9) podlega określonym modyfikacjom; np. w odniesieniu do wakansów oprócz wyrazów z k_3 oraz k_4 wystąpią dodatkowe wyrazy określające inne jeszcze odmiany procesów powstawania i zanikania wakansów (np. wskutek łączenia się wakansów z atomami międzywęzłowymi). Odpowiednio zmodyfikowane wyrazy określające wpływ źródeł wystąpią w odniesieniu do kolonii wielowakan-sowych lub atomów międzywęzłowych.

Równania tego typu umożliwiają wyznaczenie średniej gęstości dyslokacji i defektów punktowych oraz ich rozkładu w przekrojach obciążanego elementu w funkcji liczby cykli obciążeń. Konfrontacja wyników obliczeń numerycznych z danymi doświadczalnymi pozwala wyznaczyć wartości występujących w tych równaniach współczynników [20], a to z kolei ułatwia analizę szeregu specyficznych zagadnień.

Wprowadzenie do równań (5.6) lub (5.9) dodatkowych wyrazów o wyższych potęgach, analogicznych do użytych w [39, 41 i 42] w analizie rozpadu spinodalnego lub zastosowanych przez HAKENA w [51 i 52], może służyć do konfrontowania teoretycznych i doświadczalnych analogów struktur dyslokacyjnych. Ocena mnożnika termodynamicznego w równaniu (4.18) dotyczącym dyslokacji, a mogącym wejść jako część składowa do równań typu (5.5), mogłaby zapewne doprowadzić do ilościowego opisu struktur dyslokacyjnych i ich związku z własnościami materiałowymi i warunkami obciążeń.

LITERATURA CYTOWANA W TEKŚCIE

1. M. F. ASHBY, H. J. FROST, in: *Constitutive equations in elasticity* (Ed. A. S. ARGON), p. 117, Cambridge, London 1975.
2. M. F. ASHBY, *Acta Met.*, **20**, 887, 1972.
3. A. B. CROSSMAN, M. F. ASHBY, *Acta Met.*, **23**, 425, 1975.
4. U. F. KOCKS, A. S. ARGON, M. F. ASHBY, *Thermodynamics and kinetics of slip*, Progress in Materials Science, vol. 19, Pergamon Press, Oxford, New York 1975.
5. P. P. GILLIS, J. N. KELLY, *Acta Met.*, **20**, 947, 1972.
6. A. FOURDEUX, A. WRÓŃSKI, *Acta Met.*, **11**, 1271, 1963.
7. J. H. GITTUS, *Acta Met.*, **22**, 1179, 1974.
8. R. J. ARSENAULT, J. WEERTMAN, *Acta Met.*, **11**, 1119, 1963.
9. A. H. COTTRELL, *Dislocations and plastic flow in crystals*, Oxford Univ. Press, p. 195, London 1953.
10. J. C. M. LI, *Acta Met.*, **11**, 1269, 1963.
11. W. G. JOHNSTON, J. J. GILMAN, *J. Appl. Phys.*, **30**, 129, 1959.
12. N. S. AKULOV, *Acta Met.*, **12**, 1195, 1964. *Дислокации и пластичность*, Izd. AN BSSR, Mińsk 1961.
13. G. A. WEBSTER, *Phil. Mag.*, **14**, 775, 1966.
14. N. MOTT, in: *Dislocation and mechanical properties of crystals*, Wiley, New York 1957.
15. J. C. GROSSKREUTZ, H. MUGHRABI, in: *Constitutive equations in plasticity* (ed. A. S. ARGON), MIT Press, Cambridge, London 1975.
16. J. P. HIRTH, J. LOTHE, *Theory of dislocation*, McGraw-Hill Inc., New York 1968.
17. J. S. KÖHLER, in: *Imperfections in nearly perfect crystals*, Wiley, New York 1952.
18. A. GRANATO, *J. Appl. Phys.*, **27**, 789, 1956.
19. T. JOSSANG, K. SKYLSTAD, J. LOTHE, in: *The relation between structure and mechanical properties of metals*, Her Majesty's Stat. Office, London 1963.
20. S. PILECKI, *Fracture*, 1977, vol. 2, 687, ICF4, Waterloo, Canada, June 19-24, 1977.
21. N. S. AKULOV, *Phil. Mag.*, **9**, 797, 1964.
22. C. E. FELTNER, *Acta Met.*, **11**, 817, 1963.
23. K. R. EVANS, E. B. SCHWENK, *Acta Met.*, **18**, 1, 1970.
24. K. LINGA MURTY, F. A. MOHAMED, J. E. DORN, *Acta Met.*, **20**, 1009, 1972.

25. L. DARKEN, *Trans. AIME*, **174**, 184, 1948.
26. H. CONRAD, in: *The relation between structure and mechanical properties of metals*, Her Majesty's Stat. Office, London 1963.
27. P. G. SHEWMON, *Diffusion in solids*, McGraw-Hill Comp., New York-London 1963.
28. R. N. STEVENS, R. DUTTON, M. P. PULS, *Acta Met.*, **22**, 629, 1974.
29. J. C. M. LI, F. V. NOLFI, C. A. JOHNSON, *Acta Met.*, **19**, 749, 1971.
30. R. N. STEVENS, R. DUTTON, *Mat. Sci. Engng.*, **8**, 220, 1971.
31. M. P. PULS, R. DUTTON, R. N. STEVENS, *Acta Met.*, **22**, 639, 1974.
32. M. F. ASHBY, *Scripta Met.*, **3**, 837, 1969.
33. M. F. ASHBY, *Scripta Met.*, **3**, 843, 1969.
34. M. F. ASHBY, R. A. WERRALL, *Acta Met.*, **21**, 149, 1973.
35. S. R. DE GROOT, *Thermodynamics of irreversible processes*, Interscience Publ., New York 1952.
36. J. W. CAHN, *Acta Met.*, **11**, 1275, 1963.
37. J. W. CAHN, *Acta Met.*, **9**, 795, 1961.
38. S. M. ALLEN, J. W. CAHN, *Acta Met.*, **23**, 1017, 1975.
39. L. A. SWANGER, P. K. GUPTA, A. R. COOPER, *Acta Met.*, **18**, 9, 1970.
40. E. L. HUSTON, J. W. CAHN, J. E. HILLIARD, *Acta Met.*, **14**, 1053, 1966.
41. J. W. CAHN, *Acta Met.*, **14**, 1685, 1966.
42. R. W. HOPPER, D. R. UHLMAN, *Acta Met.*, **21**, 35, 267, 377, 1973.
43. W. G. HENRY, S. SAIMOTO, *Acta Met.*, **21**, 499, 1973.
44. T. ERICSSON, *Acta Met.*, **14**, 1973, 1966.
45. R. J. LIVAK, G. THOMAS, *Acta Met.*, **22**, 589, 1974.
46. S. PILECKI, *Wstęp do dyfuzyjnej teorii zmęczenia metali*, Prace IPPT PAN, **8**, 1971.
47. S. PILECKI, [w przygotowaniu].
48. L. H. SCHWARTZ, S. MAHAJAN, J. T. PLEWES, *Acta Met.*, **22**, 601, 1974.
49. B. BURTON, B. D. BASTOW, *Acta Met.*, **21**, 13, 1973.
50. E. P. BUTLER, V. RAMASWAMY, P. R. SWANN, *Acta Met.*, **21**, 517, 1973.
51. H. HAKEN, *Advanced synergetics*, Springer, Berlin-Tokio, 1983.
52. H. KAKEN (ed.), *Chaos and order in nature*, Springer Serier in Synergetics, vol. 11, Berlin 1981.
53. W. SEITH, *Diffusion in Metallen*, Springer, Berlin 1955.

РЕЗЮМЕ

ВОЗМОЖНОСТИ ОПИСАНИЯ УСРЕДНЕННОЙ ПЛОТНОСТИ
И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ ПРИ ПОМОЩИ УРАВНЕНИЙ
ДИФФУЗИИ С ИСТОЧНИКАМИ

Работа имеет целью доказательство, что усредненные эффекты перемещений дислокаций (и точечных дефектов) можно описать при помощи уравнений диффузии с дополнительными положительными и отрицательными источниками. Исходя из общеизвестных соотношений между пластической деформацией и перемещениями дислокаций указаны аналогии потока дислокаций выступающего в этом соотношениях, с потоком дислокаций, дрейфующих под влиянием перемещенных нагружений. Обсуждан возможные виды уравнений диффузии (Онзагера и Фика), обращено внимание на их эквивалентность и заменимость. В равной степени можно использовать один или второй их вид, если только правильно установить граничные условия и значения коэффициентов (подвижности или диффузии). Используя примеры эффектов обратной диффузии и спинального распада сплавов, выражается надежда на возможность описания сложной дислокационной структуры при помощи уравнений диффузии с дополнительными сос-

творяющими, выражающими более сложные процессы. Сформулировано уравнение диффузии с источниками ис учетом м.пр. воздействия внешней поверхности металла, которые дают возможность вычислить среднюю плотность дислокаций или точечных дефектов, а также на пространственные распределения.

SUMMARY

The paper is aimed at proving that the averaged effects of dislocation (and point defects) displacements may be described by means of the diffusion equations with additional (positive and negative) sources. Starting from the known relations between the plastic strains and dislocation displacements, the dislocation flux appearing in those reactions is shown to be analogous with the dislocations drift produced by variable loading. Action of external loads is shown to be equivalent to the action of chemical potential gradient, so that the effects of (variable) loading may be described by the diffusion equation written in the Onsager form. Possible forms of the diffusion equations (due to Onsager and Fick) are discussed; both forms are shown to be equivalent provided the boundary conditions and diffusion or mobility coefficients are properly assumed. Examples of inverse diffusion and spinodal decay of alloys are used to suggest the possibility that a complex dislocation structure may be put in the form of diffusion equations with additional terms describing more complex processes. The diffusion equations taking into account the existence of sources and possible interaction with external boundary are formulated; they make it possible to evaluate the average density of dislocations or point defects and their spatial distributions.

**POLSKA AKADEMIA NAUK
INSTYTUT PODSTAWOWYCH PROBLEMÓW TECHNIKI**

Praca została złożona w Redakcji w dniu 20 lutego 1987 r.